

І. О. Вакарчук

ТЕОРІЯ ЗОРЯНИХ СПЕКТРІВ

*Допущено Міністерством освіти і науки України
як підручник для студентів астрономічних
та фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів*

ББК В661.4я73–1
В146
УДК 524.3–355(07)

ВАКАРЧУК І. О.

V146 Теорія зоряних спектрів: Підручник.— Львів: Львівський національний університет імені Івана Франка, 2002.— 359 с.: 20 іл.

Виходячи з основних принципів квантової механіки, виведено рівняння переносу випромінювання в зоряних атмосферах у наближенні однофотонних переходів, коли беруться до уваги процеси поглинання та випромінювання світла й послідовно враховуються процеси розсіяння — двофотонні переходи. Особливу увагу звернуто на детальне виведення таких величин, як коефіцієнт поглинання та перерізи когерентного й некогерентного розсіяння. Розкрито фізичні й математичні механізми природної ширини спектральної лінії та її розширення внаслідок міжчастинкових взаємодій, теплових і турбулентних рухів в атмосфері зір та інших механізмів, таких, як обертання та пульсації зір, магнітні поля, надтонка структура енергетичних рівнів атомів. Розвинуто релаксаційну теорію ударного механізму розширення ліній та сталої загасання з урахуванням ван-дер-ваальсівських, постван-дер-ваальсівських та відштовхувальних міжатомних взаємодій. Подано розв'язок рівнянь переносу випромінювання, характеристику спектральних ліній, методи визначення хімічного вмісту елементів у зоряних атмосферах. Знайдено рівняння для заселеностей атомних станів при відсутності термодинамічної рівноваги.

Для студентів, аспірантів та молодих учених.

Рецензенти: д-р фіз.-мат. наук, член-кор. НАН України **Р. І. Костик**
(Головна астрономічна обсерваторія НАН України, м. Київ);
д-р фіз.-мат. наук **Б. І. Гнатик** (Астрономічна обсерваторія
Київського національного університету імені Тараса Шевченка)

Мовний редактор: канд. філол. наук, доц. **М. П. Білоус**

Друкуються за ухвалою Вченої ради Львівського національного університету імені Івана Франка

VAKARCHUK I. O.

Theory of Stellar Spectra: A Manual.— Lviv: Lviv University Press, 2002.— 359 p.: 20 fig.

Proceeding from the main principles of quantum mechanics the radiation transfer equation in stellar atmospheres in the one-photon transitions approximation has been derived. The processes of light absorption and radiation as well as those of its scattering (two-photon transitions) have been consistently taken into account. Special attention has been given to issues of a detailed derivation of such quantities as the absorption factor and cross-sections of coherent as well as non-coherent scattering. Physical and mathematical mechanisms of the spectral line natural width and its expansion caused by inter-particle interactions, thermal and turbulence motions in stellar atmosphere and other mechanisms such as stellar rotation and pulsation, super-fine structure of the atomic levels and magnetic fields have been expounded. A relaxation theory of the shock mechanism of lines broadening and damping constant has been developed with the consideration of van-der-Waals, post-van-der-Waals and repulsing inter-atomic interactions. The solution of the radiation transfer equations as well as the characteristics of spectral lines and methods of determining the chemical content of elements in stellar atmospheres have been given. An equation for the occupancy of the atomic states at the absence of thermodynamic equilibrium has been found.

The handbook is meant for university students as well as post-graduates and beginning researchers.

ISBN 966–613–170–6

© I. O. Вакарчук, 2002

ЗМІСТ

Передмова	7
Розділ I. Квантова теорія переносу випромінювання в зоряних атмосферах	9
§ 1. Елементарні процеси в зоряній атмосфері з участю фотонів	9
§ 2. Стани атомних систем й електромагнітного поля .	13
§ 3. Взаємодія поля випромінювання з атомними системами	25
§ 4. Кінетичне рівняння для фотонів	27
§ 5. Інтеграл зіткнень для однофотонних переходів . . .	36
§ 6. Рівняння переносу випромінювання в наближенні однофотонних переходів	41
§ 7. Інтеграл зіткнень для процесів розсіяння	45
§ 8. Рівняння переносу випромінювання з урахуванням процесів поглинання й розсіяння . .	52
Розділ II. Природна ширина спектральних ліній	59
§ 9. Класична теорія природної ширини спектральної лінії	59
§ 10. Теорія квазістаціонарних станів квантових систем	65
§ 11. Квантова теорія природної ширини спектральної лінії	72
§ 12. Урахування природної ширини ліній у рівнянні переносу випромінювання	79

Розділ III. Коефіцієнт поглинання в лінії	84
§ 13. Ефект Доплера	84
§ 14. Розширення спектральних ліній турбулентними рухами в зоряній атмосфері	91
§ 15. Функція Фойгта	99
§ 16. Міжчастинкова взаємодія й розширення спектральних ліній	106
§ 17. Розширення спектральних ліній атома зарядженими частинками	109
§ 18. Функція розподілу мікрополів	116
§ 19. Розподіл Гольцмарка	127
§ 20. Згортка ґауссівського, лоренцівського і штарківського контурів	132
§ 21. Релаксаційна теорія ударного наближення	146
§ 22. Вплив магнітного поля зір на контури спектральних ліній	156
§ 23. Надтонка структура спектральних ліній	164
Розділ IV. Сили осцилятора	168
§ 24. Правило сум для сил осцилятора	168
§ 25. Сила осцилятора для лінійного гармонічного осцилятора	170
§ 26. Сили осцилятора водневоподібних атомів. Серія Лаймана	173
§ 27. Сили осцилятора для серії Бальмера	181
§ 28. Квазікласичне наближення для сил осцилятора	183
§ 29. Вимірювання сил осцилятора	188
Розділ V. Стала загасання	192
§ 30. Енергія взаємодії атома з частинками оточення	192
§ 31. Розрахунок фаз розсіяння	200
§ 32. Час життя квазістаціонарних станів і зсув енергетичних рівнів атома	202
§ 33. Ван-дер-ваальсівська стала загасання	208
§ 34. Постван-дер-ваальсівське розширення спектральних ліній	212

§ 35. Внесок сил відштовхування у сталу загасання	216
§ 36. Розширення спектральних ліній водню електронами	219
Розділ VI. Коефіцієнт неперервного поглинання	226
§ 37. Сили осцилятора атома водню для зв'язано-вільних переходів. Борнівське наближення	226
§ 38. Точний розрахунок сили осцилятора атома водню для переходу з K -оболонки в неперервний спектр .	230
§ 39. Сили осцилятора для вільно-вільних переходів. Борнівське наближення	235
§ 40. Квазікласичне наближення для сил осциляторів атома водню в неперервному спектрі	240
§ 41. Коефіцієнт неперервного поглинання атома водню. Вільно-вільні переходи	246
§ 42. Коефіцієнт неперервного поглинання атома водню. Зв'язано-вільні переходи	249
§ 43. Повний коефіцієнт неперервного поглинання для атома водню	256
§ 44. Коефіцієнт неперервного поглинання від'ємного йона водню H^-	257
§ 45. Неперервне поглинання іншими атомами	264
Розділ VII. Функція перерозподілу за частотами та коефіцієнт розсіяння	267
§ 46. Функція перерозподілу за частотами	267
§ 47. Наближені вирази для функцій перерозподілу за частотами	276
§ 48. Розсіяння на вільних зарядах	282
§ 49. Релеївське розсіяння на атомах	286
§ 50. Резонансна флюоресценція	288
Розділ VIII. Аналіз зоряних атмосфер	292
§ 51. Розв'язок рівняння переносу випромінювання	292
§ 52. Глибини та еквівалентні ширини спектральних ліній	298

§ 53. Теорія моделей зоряних атмосфер	308
§ 54. Хімічний аналіз зоряних атмосфер	321
§ 55. Вплив обертання та пульсації зір на спектральні лінії	325
Розділ IX. Заселеності атомних станів за відсутності локальної термодинамічної рівноваги	332
§ 56. Кінетичне рівняння для заселеності атомних станів	332
§ 57. Радіативна складова рівняння стаціонарності	335
§ 58. Швидкості квантових переходів атома внаслідок міжчастинкових зіткнень	341
Післямова	351
Бібліографія	353
Предметний покажчик	356
Іменний покажчик	358

Передмова

Увазі Читача пропонуємо книжку, написану на основі лекцій, які автор читав для студентів Львівського університету, що спеціалізуються з теоретичної фізики та астрофізики. Вона присвячена теорії зоряних спектрів — одному з основних розділів теоретичної астрофізики.

Із фізики зоряних атмосфер є декілька чудових монографій та підручників, які подані у списку літератури. У них з різним рівнем строгості та різним обсягом подано й теорію зоряних спектрів. Однак для студентів і молодих учених доступ до цих книжок обмежений, оскільки пройшли роки і вони стали бібліографічною рідкістю. Крім того, є потреба в оновленні матеріалу, адже астрофізика — це наука, що швидко розвивається, і вдосконалення інструментальних можливостей ставить завдання тоншого аналізу й інтерпретації результатів спостереження. Через те що це підручник, то посилань на оригінальні статті не подаємо, за поодинокими винятками у виносках, тим більше, що охоплення численної бібліографії потребує видання окремої книги.

Вивчення зоряної атмосфери передбачає знаходження в кожній її точці хімічного складу, густини, температури та відтворення фізичних процесів, що відбуваються в ній. Наша книжка присвячена не числовим розрахункам параметрів конкретних спектральних ліній атомів, а мікроскопічному обґрунтуванню, виведенню й детальному аналізу тих рівнянь і виразів, на основі яких проводять такі обчислення. Центральною проблемою при цьому є побудова рівняння переносу випромінювання. Найпопулярнішим підходом до побудови такого рівняння є розгляд елементарних процесів збудження і йонізації атомів у зоряній атмосфері та опис їх на основі рівнянь квантової механіки багатьох тіл. Саме такий шлях і вибрали ми в цьому підручнику. При такому атомному підході немає потреби вводити в задачу параметри, що спеціально підбирають у феноменологічних теоріях з певних фізичних припущень. Крім того, при такому підході стає зрозуміло, ціною яких наближень отримуємо феноменологічні рів-

няння, визначаючи тим самим сферу їх застосування. Рівняння, виведені на мікроскопічному рівні, застосовні й у тих випадках, коли феноменологічні рівняння “відмовляються працювати”, наприклад, при врахуванні нелінійних ефектів та вивченні тонких і важливих деталей спостережуваного спектра випромінювання зір.

Структура книжки побудована так, що Читач поступово проходить шлях від постановки задачі до остаточних виразів для величин, які вимірюють експериментально, з детальним і ретельним виченням фізичних та математичних механізмів досліджуваних явищ, з обговоренням тих припущень та наближень, що є неминучими для досягнення мети. Деякі з наведених результатів отримано тут уперше. У виносках подаємо відомості про вчених, які творили в ділянках, заторкнутих при викладенні матеріалу, а також інші цікаві, на наш погляд, думки й асоціації, які, можливо, підштовхнуть до дискусій про співвідношення різних явищ навколишнього світу.

Підручник адресований передусім студентам та аспірантам фізичних факультетів університетів, які спеціалізуються з астрофізики та теоретичної фізики. Його можуть використовувати і студенти інших спеціалізацій при вивченні процесів поглинання та розсіяння світла у твердих тілах і рідинах. Книжку можна рекомендувати також молодим ученим, що працюють над проблемами фізики зоряних атмосфер, атомної спектроскопії та суміжних ділянок.

Висловлюю щире подяку своїм колегам В. Ткачукові, Р. Рикалюкові, Б. Новосядлому, А. Ровенчакові, Т. Фітьові та М. Колінькові, що так несподівано і рано пішов від нас, — вони люб’язно прочитали рукопис цього підручника й дали корисні поради та зауваження. Особливу подяку висловлюю також О. Кіктевій за комп’ютерний набір книжки, допомогу та турботу при її підготовці до друку.

Іван Вакарчук

Львів, травень, 2002.

РОЗДІЛ І

КВАНТОВА ТЕОРІЯ ПЕРЕНОСУ ВИПРОМІНЮВАННЯ В ЗОРЯНИХ АТМОСФЕРАХ

§ 1. Елементарні процеси в зоряній атмосфері з участю фотонів

Аналіз випромінювання зорі з метою одержання достовірних висновків про природу й будову космічних об'єктів вимагає глибокого вивчення механізмів взаємодії випромінювання з атомними системами. Лише такий першопринципний підхід дозволяє отримувати фундаментальні знання про протікання багатьох різноманітних процесів у зоряних атмосферах. Проте було б помилкою вважати, що так легко підібратись до доброго розуміння фізичних явищ, маючи спектральний розподіл енергії випромінювання космічного тіла. Проблема аналізу та інтерпретації спостережуваних даних вимагає значних зусиль та неабиякої винахідливості.

З метою ілюстрації всієї складності завдання, яке стоїть перед дослідником, наводимо на рис. 1 ділянку типового зоряного спектра. За цим “хаотичним” частоколом розподілу енергії від довжини хвилі (єдиним джерелом інформації про зорю) потрібно “відгадати” фізичні процеси, що відбуваються в атмосфері зорі, знайти її хімічний склад, отримати відомості про температуру, густину, магнітні поля, період обертання, інші параметри та вказати механізми, що творять саме такий спектр, який ми спостерігаємо на Землі.

На перший погляд, це може видаватись безнадійною справою, але якщо на кожному етапі дослідження проводити детальний

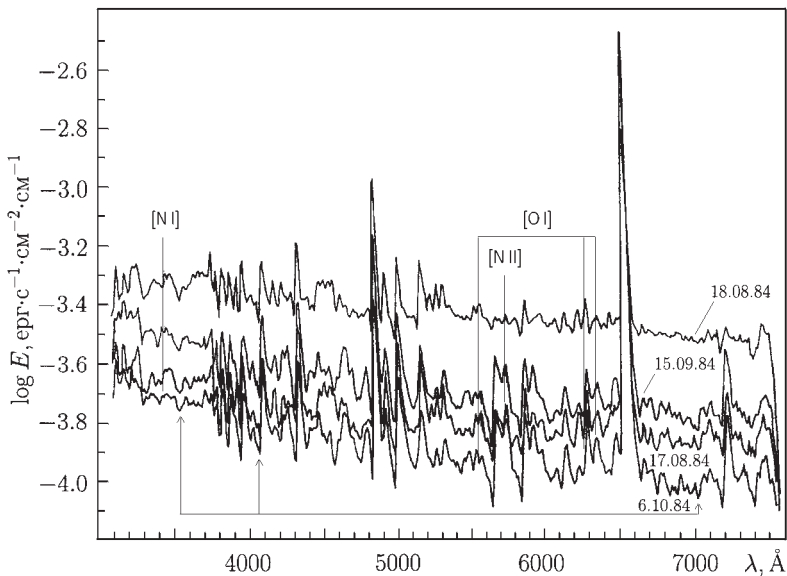


Рис. 1. Розподіл енергії в спектрі PW Vul (Нової Лисички 1984 №1) для чотирьох дат спостереження, наведених справа. Спектрофотометричні дослідження проведено у Кримській астрофізичній обсерваторії за допомогою скануючого спектрофотометра АСП-38, встановленого на 125-см рефlectorі АЗТ-11. Стрілками відзначено положення ділянок континууму (В. И. Бурнашев, Известия Крымской астрофизической обсерватории, 1995, т. 90, с. 169).

аналіз із застосуванням фізичних концепцій, які ґрунтуються на універсальних фізичних принципах квантової механіки багатьох тіл, то крок за кроком ми будемо просуватись до все більшого розуміння того, що криється за цією криптограмою зоряного спектра.

Зоряна атмосфера більшості зір складається, в основному, з водню (~ 90%) й гелію (~ 10%), атомів інших елементів — на декілька порядків менше. Певна кількість атомів і молекул, унаслідок взаємодії з випромінюванням і між собою, перебуває на різних ступенях йонізації. Таким чином, зоряна атмосфера — це частково йонізований газ.

Випромінювання є основним механізмом переносу енергії в зоряній атмосфері. Це зумовлено тим, що теплопровідність атмосфери як газової системи є надзвичайно малою, а перенесення енергії шляхом конвекції також складає незначну долю. Отже, виникає задача про дослідження переносу випромінювання в частково йонізованому газі. Причому з усієї перехідної ділянки між ядром зорі й міжзоряним середовищем нас цікавитиме саме фотосфера, тобто той шар атмосфери, у якому і створюється основна частина видимої та прилеглих до неї ділянок спостережуваного спектра. Товщина цього шару атмосфери зорі складає незначну долю її радіуса.

Досліджувана система “частково йонізований газ плюс електромагнітне поле” є термодинамічно нерівноважною системою. Її стан визначається розподілом частинок газу й фотонів за квантовими станами. Цей розподіл своєю чергою диктується всіма елементарними процесами взаємодії між частинками системи. Основні типи частинок, які беруть участь у цих процесах, — це фотон, електрон, атом або молекула в основному чи в збуджених станах, додатні та від’ємні йони атомів або молекул.

Повний опис стану атмосфери вимагає спільного розв’язку рівняння переносу випромінювання та рівнянь, які визначають заселеність квантових рівнів атомів газу. У стані термодинамічної рівноваги заселеність атомних рівнів залежить від температури й густини газу. Якщо заселеність рівнів не дуже відрізняється від рівноважної в кожній точці атмосфери, то стан речовини атмосфери визначається локальною температурою й локальною густиною. Це так звана гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги. У такому підході задача значно спрощується і зводиться до розв’язку лише рівняння переносу випромінювання.

Виведення рівнянь переносу випромінювання з міркувань енергетичного балансу на основі феноменологічного підходу Читач може знайти в ґрунтовних підручниках чи монографіях [1–7], які відображають тогочасні великі досягнення в розумінні фізики зоряних атмосфер і добре відомі старшому поколінню любителів астрономії. Тут ми ставимо собі за завдання отримати це

рівняння на основі мікроскопічного підходу, виходячи з першопринципних фундаментальних законів квантової механіки систем багатьох взаємодіючих частинок.

Надалі в цьому розділі зосередимо увагу саме на виведенні й дослідженні рівняння переносу випромінювання — кінетичного рівняння для фотонів. Тому обмежимося розглядом основних процесів взаємодії атомних систем із фотонами.

Почнемо зі зв'язано-зв'язаних переходів: поглинання або випромінювання фотона із частотою ω оптичним електроном, тобто електроном, який перебуває у зв'язаному стані. Схематично цей процес зображають так:



де літери A , A' позначають атомні стани. Реакція



зображає зв'язано-вільні переходи, коли поглинання супроводжується переходом електрона у стани з неперервною енергією. Прямий процес описує фотойонізацію, або фотоефект, зворотний перехід — фоторекombінацію. Вільно-вільні переходи,



— це переходи електронів між станами в неперервному спектрі. Прямий процес супроводжується гальмівним поглинанням, зворотний — гальмівним випромінюванням. Зауважимо, що електрони в станах неперервного спектра аж ніяк не вільні: на них діють сили кулонівського притягання та відштовхування з боку частинок оточення.

Розглянуті процеси називають однофотонними переходами, тому що в реакціях бере участь один фотон. Розсіяння світла описується двофотонними переходами:



Імовірність двофотонних переходів є значно меншою, ніж імовірність однофотонних переходів.

Для фактичного опису вказаних елементарних процесів необхідно зупинитись на термінології й тих кількісних характеристиках, що описують стан електромагнітного поля й атомних систем.

§ 2. Стани атомних систем й електромагнітного поля

Стан атомної системи (електрон, атом, молекула та їх сукупності) задається хвильовою функцією $\psi_A(\xi)$, яка задовольняє рівняння Шрединґера. Індекс стану A — це набір власних значень фізичних величин або відповідних квантових чисел, що визначають стан системи; індекс зображення ξ — це сукупність змінних, від яких залежить хвильова функція. Для скороченого запису будемо користуватись позначеннями Дірака, $\psi_A = |A\rangle$ ¹.

Стан електромагнітного поля в класичній електродинаміці задається напруженостями електричного й магнітного полів, які є функціями координат точки простору та часу і задовольняють рівняння Максвелла². У квантовій теорії стан електромагнітного поля задається хвильовою функцією $\psi_{\dots, N_{\mathbf{k}, \alpha}, \dots}(Q)$. Набір чисел $\{\dots, N_{\mathbf{k}, \alpha}, \dots\}$ фіксує кількість фотонів $N_{\mathbf{k}, \alpha}$ з імпульсом

¹Ервін Шрединґер (1887–1961), Поль Адріан Моріс Дірак (1902–1984) — одні з творців квантової механіки, лауреати Нобелівської премії з фізики 1933 року за відкриття нових форм атомної теорії. У 1925–1926 роках професор Цюрихського університету Е. Шрединґер відкрив фундаментальне рівняння квантової механіки (рівняння Шрединґера) і створив так звану хвильову квантову механіку. Її перший варіант — матричну квантову механіку — створив німецький фізик-теоретик Вернер Гайзенберг (1901–1976), якого нагороджено за це відкриття Нобелівською премією 1932 року. Англійський фізик-теоретик П. Дірак побудував у 1928 році релятивістську квантову механіку, об'єднавши за допомогою оригінального способу добування квадратного кореня основні принципи квантової механіки та теорії відносності, з якої природно, хоча й несподівано, виникли позитрон та спіні електрона.

²Джеймс Клерк Максвелл (1831–1879) — видатний англійський фізик; творець теорії електромагнітного поля, сформульованої в 1860–1865 роках у вигляді системи кількох рівнянь (рівняння Максвелла); 1860 року встановив закон, що описує розподіл молекул газу за швидкостями (розподіл Максвелла); займався також багатьма іншими проблемами, зокрема теорією кольорів, стійкістю кілець Сатурна, теорією пружності. Його перша наукова робота опублікована, коли йому було 14 років.

$\hbar\mathbf{k}$ і поляризацією α . Хвильовий вектор \mathbf{k} визначає напрям поширення світла та його частоту $\omega = kc$, $k = |\mathbf{k}|$, c — швидкість світла. Унаслідок поперечності поля індекс α приймає два значення. За координати Q можна вибрати сам набір чисел $N_{\mathbf{k},\alpha}$ (власне зображення) або узагальнені координати сукупності осциляторів, що моделюють стан електромагнітного поля в класичній теорії. Надалі індекс зображення Q опускаємо і скорочено запишемо: $\psi_{\dots, N_{\mathbf{k},\alpha}, \dots} = |\dots, N_{\mathbf{k},\alpha}, \dots\rangle$.

Тут і далі для опису квантовомеханічних систем та явищ використовуємо методи, результати й позначення, наведені у підручнику з квантової механіки [8].

З макроскопічної точки зору повний опис електромагнітного поля дає питома інтенсивність випромінювання, яку реєструють прилади, що використовуються для спостереження небесних тіл. У зв'язку із цим необхідно встановити зв'язок між питомою інтенсивністю випромінювання та кількістю фотонів.

Зручно розглядати поле спочатку в деякому скінченному об'ємі V у формі куба зі стороною L , $V = L^3$. Компоненти хвильового вектора фотона є в цьому випадку дискретними і набувають значень, кратних до $2\pi/L$: $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, $k_i = 2\pi n_i/L$, $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. При переході до макроскопічного об'єму ($V \rightarrow \infty$) компоненти хвильового вектора змінюються неперервно, а суми за хвильовими векторами переходять відповідно в інтеграли:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} &\equiv \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \\ &\equiv \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Величина $V dk_x dk_y dk_z / (2\pi)^3$ є кількістю власних коливань поля з компонентами хвильового вектора в інтервалах dk_x, dk_y, dk_z . Кількість коливань з абсолютною величиною хвильового вектора в інтервалі dk і в напрямку, що лежить у тілесному куті $d\Omega$, одержуємо переходом до сферичної системи координат:

$Vk^2 dk d\Omega/(2\pi)^3$. Уводячи частоту $\omega = kc$ і домножуючи кількість коливань на число $N_{\mathbf{k},\alpha}$, отримаємо $N_{\mathbf{k},\alpha}V\omega^2 d\omega d\Omega/(2\pi c)^3$ — кількість фотонів із поляризацією α і з частотами в інтервалі між ω та $\omega + d\omega$, що поширюються в тілесному куті $d\Omega$. Помножимо далі цей вираз на енергію фотона $\hbar\omega$ і поділимо на $Vd\omega d\Omega$. У результаті знаходимо енергію електромагнітного поля із частотою ω та поляризацією α , що припадає на одиницю об'єму, одиницю тілесного кута й одиничний інтервал частот. Нарешті, ця величина, помножена на швидкість світла c , і дає питому інтенсивність випромінювання

$$I_{\mathbf{k},\alpha} = \frac{\hbar\omega^3}{(2\pi)^3 c^2} N_{\mathbf{k},\alpha} \quad (2.2)$$

— кількість енергії, що переноситься випромінюванням частоти ω і поляризації α за одиницю часу в одиницю тілесного кута в одиничному інтервалі частот крізь одиничну площадку (поверхні тіла, що випромінює), перпендикулярну до напрямку поширення променів.

Інтенсивність поля, як і кількість фотонів, є також функціями часу й точки простору в зоряній атмосфері. Цю залежність виписувати явно не будемо. Індeksi \mathbf{k} , α однозначно задають частоту, поляризацію та напрям поширення світла: $I_{\mathbf{k},\alpha} = I(\omega, \alpha, \Omega)$.

Середню інтенсивність визначаємо як усереднену за всіма напрямками питому інтенсивність

$$J_{\omega,\alpha} = \frac{1}{4\pi} \int I_{\mathbf{k},\alpha} d\Omega. \quad (2.3)$$

Повний потік енергії випромінювання знаходимо шляхом інтегрування питомої інтенсивності за всіма частотами й кутами та підсумовування за поляризаціями:

$$\sum_{\alpha=1,2} \int_0^{\infty} d\omega \int d\Omega I_{\mathbf{k},\alpha} = 4\pi \sum_{\alpha=1,2} \int_0^{\infty} d\omega J_{\omega,\alpha} = 4\pi J, \quad (2.4)$$

де J — інтегральна середня інтенсивність. Для абсолютно чорного тіла ця величина, як відомо, дорівнює $\sigma T^4/\pi$, де стала

Стефана–Больцмана $\sigma = \pi^2/(60\hbar^3 c^2)$, температуру T вимірюємо в енергетичних одиницях. Якщо температуру вимірювати в градусах Кельвіна, то замість T тут і надалі протрібно писати $k_B T$, де k_B — стала Больцмана.

Щодо одиниць вимірювання фізичних величин, то виходимо з того, що фізики різних країн послуговуються здебільшого гаусовою системою одиниць (СГС — “сантиметр, грам, секунда”), яку і ми використовуємо. Поясненням цього є причини як історичного характеру, так і, можливо, більша зручність цієї системи одиниць у теоретичній фізиці: щоб додатково не “тягнути” за собою такі сталі (а фактично коефіцієнти пропорційності), як ε_0 — електрична стала, μ_0 — магнітна стала, 4π і т. п. У цій системі одиниць, наприклад, розмірність величини $I_{\mathbf{k},\alpha}$, згідно з означенням, дорівнює ерг/(см² ×стерадіан). В прикладних та інженерних задачах перевагу надають системі СІ. Часто фізики використовують атомні одиниці, у яких заряд електрона, його маса і стала Планка дорівнюють одиниці ($e = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$). Сподіваємось, що студентів старших курсів, який вивчив загальні (експериментальні) курси фізики та курси теоретичної фізики і приступив до вивчення основ зоряної спектроскопії, не повинна складати труднощів проста процедура переходу від одних одиниць до інших. Слід лише розрізнити фундаментальні фізичні константи і звичайні коефіцієнти пропорційності, які залежать від вибору системи одиниць.

У деяких випадках зручніше користуватись питомою інтенсивністю $I(\lambda, \alpha, \Omega)$, визначеною за шкалою довжин хвиль $\lambda = 2\pi c/\omega$. Перехід до такого опису здійснюємо за допомогою рівняння:

$$\int_0^{\infty} I(\omega, \alpha, \Omega) d\omega = \int_0^{\infty} I(\lambda, \alpha, \Omega) d\lambda, \quad (2.5)$$

яке дає повний потік енергії випромінювання фіксованої поляризації в заданому напрямку. Підставмо в ліву частину частоту

$$\omega = 2\pi c/\lambda, \quad d\omega = -2\pi c d\lambda/\lambda^2$$

і (з урахуванням того, що при $\omega = 0$, $\lambda = \infty$, а при $\omega = \infty$, $\lambda = 0$) одержимо співвідношення:

$$I(\lambda, \alpha, \Omega) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} I_{\mathbf{k}, \alpha} = \frac{2\pi c}{\lambda^2} I\left(\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}, \alpha, \Omega\right). \quad (2.6)$$

Нарешті, уведемо поняття потоку енергії від зорі, що потрапляє до спостерігача. Потік є векторною величиною, яка, помножена скалярно на елемент площадки $d\mathbf{S}$, дає кількість енергії, що протікає крізь $d\mathbf{S}$ за одиницю часу в одиничному інтервалі частот. Для плоскої атмосфери, однорідної за напрямками x, y , відмінною від нуля буде лише z -компонента потоку, і саме її називатимемо просто потоком. Визначимо його як проінтегровану за всіма кутами питому інтенсивність, помножену на $\cos \theta$, θ — кут між напрямком нормалі до елементарної площадки, з якої йде випромінювання, і напрямком на спостерігача:

$$\pi F_\omega = \sum_{\alpha=1,2} \int I_{\mathbf{k}, \alpha} \cos \theta d\Omega. \quad (2.7)$$

Потік позначають як πF_ω або πF_λ залежно від того, за якою шкалою працюють: частотною чи довжин хвиль. Зміст цієї величини такий: πF_ω — це кількість енергії випромінювання, яка проходить крізь одиничну площадку, розташовану перпендикулярно до потоку фотонів, за одиницю часу в одиничному інтервалі частот. Розмірність потоку дорівнює ерг/см². Інтегрування в (2.7) необхідно виконувати окремо за півсферами: відповідно говорять про вхідний та вихідний потоки. Для ізотропного випромінювання, такого як в абсолютно чорного тіла, $\pi F_\omega = 0$. Повний потік енергії πF отримуємо інтегруванням виразу (2.7) за всіма частотами.

Множник π в означенні потоку виділяють для зручності, оскільки, якщо питома інтенсивність залежить лише від однієї координати (наприклад, z) і кута θ , то інтегрування за азимутальним кутом φ в (2.7) можна виконати:

$$F_\omega = 2 \int_0^\pi I_{\mathbf{k}, \alpha} \cos \theta \sin \theta d\theta. \quad (2.8)$$

Якщо нас цікавить потік, що залишає поверхню сфери, то інтегрування у (2.8) слід вести в межах від 0 до $\pi/2$; для потоку, що входить до сфери, інтегруємо від $\pi/2$ до π . Повний потік (2.8) дорівнює їхній сумі. Саму величину F_ω називають астрофізичним потоком, який, як бачимо, є першим моментом інтенсивності за кутовою змінною $\cos \theta$, а нульовим моментом є середня інтенсивність (2.3). Стандартно нормованим (як і у (2.3)) першим моментом буде, насправді, величина (2.7), поділена на 4π , тобто $F_\omega/4$, яку називають також еддінгтонівським потоком³.

Для Сонця ми маємо змогу вимірювати інтенсивність $I_{\mathbf{k},\alpha}$ по поверхні диска. Для інших зір, які мають точкові розміри, можна вимірювати лише потік πF_ω , тому він є природною характеристикою їхнього поля випромінювання.

Для детальнішого ознайомлення з поняттями та фізичними величинами, які характеризують поле випромінювання, Читач може звернутись до вже згаданих книжок [1–7].

Дослідження зоряних атмосфер ґрунтується на вимірюванні введеної тут інтенсивності випромінювання зорі, яке доходить до нас, за допомогою пристрою, що складається з телескопа, який збирає це світло; з нього воно потрапляє у спектрограф, прилад (дифракційна ґратка, інтерферометр), що розділяє світло за частотами або довжинами хвиль, тобто здійснює його спектральний аналіз. Після чого приймач (фотопластинка, фотопомножувач, ПЗЗ-матриця⁴) перетворює його в сигнал, що реєструється і дає вже кількісну характеристику інтенсивності світла. Під час проходження світла крізь складові такого приймача форма сигна-

³Артур Стенлі Еддінгтон (1882–1944) — видатний англійський астрофізик і фізик, зробив великий внесок у теорію руху зір, теорію внутрішньої будови та еволюції зір, теорію гравітації й фізику Сонця. У 1919 році під час дослідження спеціальною експедицією затемнення Сонця (на островах Собрал біля узбережжя Бразилії та Принсипі у Гвінейській затоці) уперше експериментально виявив і виміряв передбачене загальною теорією відносності відхилення світла зір Сонцем. Саме це і привернуло увагу громадськості до теорії відносності, а А. Айнштайн, як один з її творців, став відтоді знаменитим.

⁴Прилад із зарядовим зв'язком (англійською: CCD — charge coupled device).

лу несе на собі також інструментальні спотворення, які потрібно вміти вилучати і відтворювати первісний спектр випромінювання таким, яким він був до входження в телескоп.

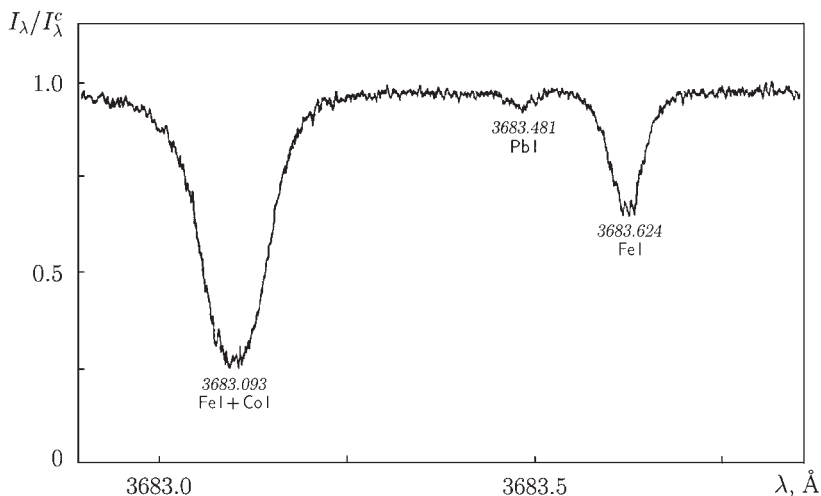


Рис. 2. Ділянка спектра Сонця (поблизу $\lambda = 3683.481 \text{ \AA}$), отриманого на Баштовому сонячному телескопі Кримської астрофізичної обсерваторії з дисперсією $0.15 \text{ \AA}/\text{мм}$. (М. З. Хохлов, Известия Крымской астрофизической обсерватории, 1959, т. 21, с. 103).

На рис. 2 наведено експериментально виміряну в Кримській астрономічній обсерваторії криву інтенсивності випромінювання Сонця у відношенні до інтенсивності неперервного спектра в околі довжини хвилі $\lambda = 3683.481 \text{ \AA}$. Зображена ділянка спектра біля лінії поглинання PbI з типовим контуром уміщає інтервал довжин хвиль величиною в один ангстрем⁵. Поруч є лінії поглинання Fe+Co ($\lambda = 3683.093 \text{ \AA}$) та Fe ($\lambda = 3683.624 \text{ \AA}$). Аналіз структури контурів ліній поглинання атомів та йонів різних елементів дає змогу одержати інформацію про фізичні процеси в зоряних атмосферах.

⁵У спектроскопії римською цифрою після символу хімічного елемента позначають ступінь йонізації атома: N I — це нейтральний атом азоту, N II — однократно йонізований і т.п.

Уведемо до розгляду кількісні характеристики спектральної лінії поглинання. Схематично контур такої лінії наведено на рис. 3.

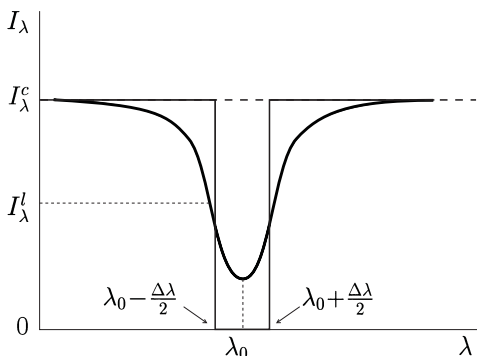


Рис. 3. Контур спектральної лінії поглинання. Суцільна жирна крива — контур спектральної лінії атома в атмосфері зорі. Прямокутний контур абсолютно чорної лінії з шириною $\Delta\lambda$ зображено суцільною тонкою лінією. Пунктирна пряма — інтенсивність неперервного спектра; вона зображена горизонтальною прямою, оскільки в межах спектральної лінії функція I_λ^c практично не змінюється. Для ізолюваного атома контур спектральної лінії є безмежно вузьким на довжині хвилі $\lambda = \lambda_0$. Розширення контуру лінії та зсув її центра зумовлені низкою фізичних механізмів, виявлення яких і є метою дослідників зоряних атмосфер.

Глибиною лінії називають відношення різниці питомих інтенсивностей у неперервному спектрі $I_{\mathbf{k},\alpha}^c$ та спектральній лінії $I_{\mathbf{k},\alpha}^l$ до питомої інтенсивності в неперервному спектрі⁶:

$$r_\lambda = \frac{I_{\mathbf{k},\alpha}^c - I_{\mathbf{k},\alpha}^l}{I_{\mathbf{k},\alpha}^c} = \frac{I^c(\lambda, \alpha, \Omega) - I^l(\lambda, \alpha, \Omega)}{I^c(\lambda, \alpha, \Omega)}. \quad (2.9)$$

Очевидно, що якщо $I_{\mathbf{k},\alpha}^l = I_{\mathbf{k},\alpha}^c$, то глибина лінії $r_\lambda = 0$ (поглинання в лінії відсутнє). Якщо $I_{\mathbf{k},\alpha}^l = 0$, тобто фотони з такою довжиною хвилі відсутні, то маємо абсолютно чорну лінію: $r_\lambda = 1$.

⁶Верхні індекси “c” і “l” у питомій інтенсивності — це перші літери англійських слів: *continuum* — неперервний спектр, континуум; *line* — лінія, контур.

Отже, глибина лінії змінюється в таких межах: $0 \leq r_\lambda \leq 1$. Залежно від чисельного значення величини r_λ говорять про слабкі ($r_\lambda \simeq 0.1 \div 0.15$) та сильні лінії.

Традиційно таке означення глибини лінії застосовують для Сонця. Лінії поглинання у спектрі Сонця вперше пояснив у 1814 році Йозеф Фраунгофер. На його честь ці лінії називають фраунгоферовими лініями⁷. Для інших зір, щоб визначити глибину ліній R_λ , використовують потік замість питомої інтенсивності:

$$R_\lambda = \frac{F_\lambda^c - F_\lambda^l}{F_\lambda^c}, \quad (2.10)$$

причому очевидно також, що $0 \leq R_\lambda \leq 1$.

Потрібно зробити важливе зауваження щодо означення глибини лінії. Мова йде про те, як установити межу між неперервним спектром і спектральною лінією. Іншими словами, яким чином фіксувати саме такий, а не інший рівень інтенсивності неперервного спектра. Зрозуміло, що для цього треба відходити якнайдалі від центра лінії туди, де її крила “спрягаються” з неперервним спектром, тобто з фоном, на якому виділяються спектральні лінії. Однак чіткого кількісного критерію розмежування немає. Щобільше, часто спектральні лінії накладаються своїми крилами одна на одну, і їх потрібно ще відділити від фонового

⁷Йозеф Фраунгофер (1787–1826) — німецький фізик. Перший дослідив і пояснив темні лінії в сонячному спектрі, зробив значний внесок у дослідження дисперсії і створення ахроматичних лінз, вивчав дифракцію при падінні на екран плоскопаралельного пучка променів (дифракція Фраунгофера), чи не вперше використав для дослідження спектрів дифракційні ґратки.

Темні лінії в сонячному спектрі вперше зауважив англійський фізик В. Г. Волластон (1766–1828) у 1802 році під час вимірювання заломлюючої здатності різних матеріалів, крізь які він пропускав промені Сонця. Це повідомлення не викликало особливого інтересу, оскільки сам автор не визнав ці лінії стійкими, вважаючи їх випадковими. У 1814–1815 роках Й. Фраунгофер, проводячи такі ж виміри і переглядаючи крізь теодоліт збільшений сонячний спектр, отриманий від призми, побачив темну лінію на тому місці, де раніше він спостеріг жовту лінію в спектрі свічки. Крім того, він виявив у спектрі Сонця ще інші темні лінії і точно виміряв положення 574-х ліній.

випромінювання⁸ (див. рис. 4). Щоб ознайомитись з мистецтвом обробки профілів фраунгоферових ліній, пропонуємо заглянути в монографію [9].

Ще однією важливою характеристикою спектральної лінії є так звана еквівалентна ширина W_{λ_0} , що характеризує повне поглинання і яку визначають так:

$$W_{\lambda_0} = \int r_{\lambda} d\lambda \quad (2.11)$$

— для ліній у спектрі Сонця і

$$W_{\lambda_0} = \int R_{\lambda} d\lambda \quad (2.12)$$

— для ліній у спектрі інших зір; λ_0 — довжина хвилі в центрі лінії. Тут інтегрування відбувається за всією шкалою довжин хвиль.

⁸Проблема фону має загальний характер, і з нею зустрічаємось у багатьох дослідженнях. Наприклад, при вимірюваннях структури конденсованих тіл, таких як рідини чи аморфні тіла, методом нейтронної або рентгенівської дифракції. Так званий структурний фактор визначають як відношення кількості розсіяних частинок на атомах речовини до інтенсивності їх розсіяння на тих самих, але невзаємодіючих, ізольованих атомах, тобто до фонові інтенсивності розсіяних частинок. Визначення останньої і складає одну з головних задач у дослідях такого типу. Її визначають або шляхом теоретичного розрахунку розсіяння частинок на ізольованому атомі, де виникають свої проблеми, або експериментально як інтенсивність розсіяння при великих імпульсах передачі, коли взаємодія між атомами дає малий внесок у розсіяння і можна вважати, що воно відбувається на незалежних атомах. Тут і виникає питання, наскільки великими повинні бути імпульси передачі, щоб відповідний рівень інтенсивності вважався фоновим.

Інший приклад — це вивчення енергетичного спектра конденсованих тіл шляхом непружного розсіяння нейтронів. Сам спектр визначають за положеннями піків динамічного структурного фактора, але визначення точки закінчення спектра є не простим завданням, оскільки ці максимуми невеликі і сильно розмиті. Для встановлення кількості бозе-конденсату в надплинному гелії-4 (кількості атомів ${}^4\text{He}$ з імпульсами, що дорівнюють нулеві) визначення фонового розсіяння є принциповим.

У зв'язку з цим цікаво пригадати, що американські астрономи А. А. Пензіас і Р. В. Вільсон у 1965 році також вирішували проблему зменшення фону у сконструйованих ними антенах і “надибали” при цьому на Нобелівську премію 1978 року за відкриття фонового реліктового випромінювання.

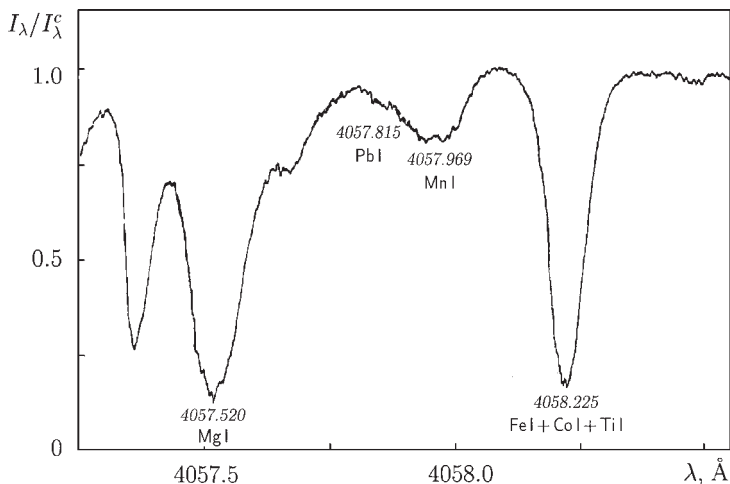


Рис. 4. Ділянка спектра Сонця (поблизу $\lambda = 4057.815 \text{ \AA}$), отриманого на Баштовому сонячному телескопі Кримської астрофізичної обсерваторії з дисперсією 0.15 \AA/мм . (М. З. Хохлов, Известия Крымской астрофизической обсерватории, 1959, т. 21, с. 103).

Якщо взяти абсолютно чорну лінію ($r_\lambda = 1$) з прямокутним контуром шириною $\Delta\lambda$, то в ній буде поглинатись стільки ж енергії, скільки й у досліджуваній лінії з еквівалентною шириною $W_{\lambda_0} = \Delta\lambda$. Справді, за означенням (див. також рис. 3)

$$I^l(\lambda, \alpha, \Omega) = \begin{cases} 0, & \lambda_0 - \Delta\lambda/2 \leq \lambda \leq \lambda_0 + \Delta\lambda/2, \\ I^c(\lambda, \alpha, \Omega), & \text{поза цим інтервалом,} \end{cases} \quad (2.13)$$

тому еквівалентна ширина

$$W_{\lambda_0} = \int r_\lambda d\lambda = \int_{\lambda_0 - \Delta\lambda/2}^{\lambda_0 + \Delta\lambda/2} d\lambda = \Delta\lambda. \quad (2.14)$$

Отже, W_{λ_0} чисельно дорівнює ширині лінії з прямокутним контуром, що виправдовує сам термін “еквівалентна ширина”,

який увів Ф. Райхе⁹. У цьому полягає зміст еквівалентної ширини лінії.

Оскільки глибина лінії $r_\lambda = r_{\lambda_0}(\Delta\lambda)$ як функція довжини хвилі швидко зменшується з відстанню $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ від її центра $\lambda = \lambda_0$, то інтегрування в означенні (2.11) еквівалентної ширини можна проводити за змінною $\Delta\lambda$ у безмежних межах:

$$W_{\lambda_0} = \int_{-\infty}^{\infty} r_{\lambda_0}(\Delta\lambda) d(\Delta\lambda). \quad (2.15)$$

Якщо користуватись частотною шкалою, то

$$W_{\lambda_0} = \int_{-\infty}^{\infty} r_{\omega_0}(\Delta\omega) d(\Delta\omega), \quad (2.16)$$

де

$$r_{\omega_0}(\Delta\omega) = \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0}} \left(\Delta\lambda = -\frac{2\pi c}{\omega_0^2} \Delta\omega \right),$$

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0, \quad \omega_0 = 2\pi c/\lambda_0.$$

Вимірювання глибин та еквівалентних ширин спектральних ліній та їх теоретичний розрахунок є центральним моментом дослідження зоряних атмосфер¹⁰.

⁹Фріц Райхе (1883-1969) — німецький фізик, 1925 року вивів правило сум для сил осцилятора.

¹⁰Механізми утворення фраунгоферових ліній та їхню тонку структуру досліджував відомий український астрофізик Б. Т. Бабій (1936–1993), працюючи на кафедрі теоретичної фізики та в астрономічній обсерваторії Львівського університету. Він експериментально виявив асиметрію фраунгоферових ліній, записи яких здійснено під час його перебування в Пулковській обсерваторії в 1961 та 1962 роках. Саме дискусії з Б. Т. Бабієм у 1980-х роках з проблем фізики Сонця, і зокрема тонкої структури лінії поглинання атомарного водню, викликали в автора активний інтерес до задач астрофізики.

§ 3. Взаємодія поля випромінювання з атомними системами

Елементарні процеси поглинання, випромінювання та розсіювання фотонів можна розглядати як квантові переходи між станами фотонного поля, тобто як переходи від одного набору чисел заповнення фотонів $\{\dots, N_{\mathbf{k},\alpha}, \dots\}$ до іншого. Такі переходи відбуваються внаслідок взаємодії електромагнітного поля з атомами речовин. У класичній електродинаміці енергія цієї взаємодії для одного електрона має такий вигляд [10–12]:

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc}(\mathbf{A}\mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2, \quad (3.1)$$

де e — заряд електрона зі своїм знаком, m — його маса, \mathbf{p} — імпульс; векторний потенціал поля \mathbf{A} залежить від координати точки простору \mathbf{r} та часу t і задовольняє умову поперечності, $\text{div } \mathbf{A} = 0$. Скалярний потенціал вільного електромагнітного поля завжди можна покласти рівним нулеві.

Перехід до квантового опису здійснюємо заміною динамічних величин операторами. Імпульс електрона замінюємо оператором імпульсу, у координатному зображенні $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Векторний потенціал також є оператором, який діє на числа заповнення фотонів [8, 10]:

$$\hat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega_{\mathbf{k}} V} \right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{B}_{\mathbf{k},\alpha} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+ \right), \quad (3.2)$$

де $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha}$ — одиничний вектор поляризації фотона, причому, внаслідок умови поперечності поля, $\mathbf{k}\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha} = 0$; частота $\omega_{\mathbf{k}} = kc$. Дія операторів $\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}$ і $\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+$ на хвильові функції поля задається рівностями:

$$\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha} |\dots, N_{\mathbf{k},\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k},\alpha}} |\dots, N_{\mathbf{k},\alpha} - 1, \dots\rangle, \quad (3.3)$$

$$\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+ |\dots, N_{\mathbf{k},\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k},\alpha} + 1} |\dots, N_{\mathbf{k},\alpha} + 1, \dots\rangle.$$

Таким чином, оператор $\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}$ знищує фотон з імпульсом $\hbar\mathbf{k}$ і поляризацією α , зменшуючи кількість таких фотонів поля на одиницю. Спряжений до нього оператор $\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+$, діючи на стан поля, збільшує кількість фотонів на одиницю, породжуючи фотон з імпульсом $\hbar\mathbf{k}$ і поляризацією α . Оператори $\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+$ та $\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}$ називають операторами породження і знищення фотонів. Ці оператори задовольняють переставні співвідношення статистики Бозе–Айнштейна:

$$\begin{aligned}\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}\hat{B}_{\mathbf{k}',\alpha'}^+ - \hat{B}_{\mathbf{k}',\alpha'}^+\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha} &= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\alpha,\alpha'}, \\ \hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}\hat{B}_{\mathbf{k}',\alpha'} - \hat{B}_{\mathbf{k}',\alpha'}\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha} &= 0, \\ \hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+\hat{B}_{\mathbf{k}',\alpha'}^+ - \hat{B}_{\mathbf{k}',\alpha'}^+\hat{B}_{\mathbf{k},\alpha}^+ &= 0.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Надалі для спрощення запису введемо такі позначення:

$$q \equiv (\mathbf{k}, \alpha), \quad \sum_q \equiv \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{k}.\tag{3.5}$$

Взаємодія (3.1) електромагнітного поля з речовиною викликає квантові переходи в системі “електромагнітне поле плюс атоми речовини”, стани якої описують хвильовою функцією, що є добутком хвильових функцій поля й атомів. Імовірність переходу за одиницю часу з початкового стану системи $|i\rangle = |A; \dots, N_q, \dots\rangle$ в кінцевий $|f\rangle = |A'; \dots, N'_q, \dots\rangle$ дається в першому наближенні відомим із квантової механіки виразом [8]:

$$w_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{V}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i),\tag{3.6}$$

де E_i , E_f — енергії початкового й кінцевого станів. Матричні елементи оператора взаємодії \hat{V} , який задається виразом (3.1) із заміною в ньому величин \mathbf{p} та \mathbf{A} відповідними операторами $\hat{\mathbf{p}}$ та $\hat{\mathbf{A}}$, обраховують на станах незбуреної системи, хвильові функції якої є добутком хвильових функцій атома та електромагнітного поля (див. § 2):

$$\hat{V}_{fi} = \langle A'; \dots, N'_q, \dots | \hat{V} | A; \dots, N_q, \dots \rangle$$

$$= \int \psi_{A'}^*(\xi) \psi_{\dots, N'_q, \dots}^*(Q) \hat{V} \psi_{\dots, N_q, \dots}(Q) \psi_A(\xi) d\xi dQ. \quad (3.7)$$

Перший член енергії взаємодії (3.1), лінійний за операторами породження і знищення фотонів, здійснює однофотонні переходи, а другий доданок, квадратичний за цими операторами, — двофотонні. Таким чином, для реакцій (1.1)–(1.3) з участю одного фотона ймовірність переходу визначається виразом (3.6) з урахуванням лише першого доданка в операторі (3.1).

Для двофотонних переходів перший доданок у (3.1) не дає внеску — його матричні елементи \hat{V}_{fi} для цих переходів дорівнюють нулеві, і ефект першого наближення від нього відсутній. Для коректного опису двофотонних переходів, крім урахування другого доданка в (3.1), необхідно взяти до уваги внесок від першого доданка в другому наближенні. Для цього вираз для ймовірності переходу беремо в другому наближенні [8, 13]:

$$w_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \hat{V}_{fi} + \sum_{f' \atop (f' \neq i)} \frac{\hat{V}_{ff'} \hat{V}_{f'i}}{E_i - E_{f'}} \right|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (3.8)$$

Щоб не втомлювати Читача, ми обмежимося тепер лише цим переліком потрібних у подальшому викладі формул.

§ 4. Кінетичне рівняння для фотонів

Уся енергія випромінювання, що йде з центральних ділянок зорі, проходить крізь атмосферу й виноситься в навколишній простір. Таким чином, в атмосфері відбувається лише перерозподіл променевої енергії за частотами. Цей перерозподіл зумовлений взаємодією фотонів з атомами й атомів між собою. Вільно-вільні та вільно-зв'язані електронні переходи змінюють форму спектра неперервного випромінювання зорі. На фоні неперервного спектра спостерігаються лінії поглинання або лінії випромінювання, зумовлені електронними переходами між зв'язаними станами в атомах і молекулах. Характер перерозподілу променевої енергії дає важливу інформацію про фізичні умови на зорі:

температуру, прискорення сили тяжіння на її поверхні, магнітні поля, хімічний склад і т. п. Відтворення фізичних процесів за спостережуваним спектром зорі є надзвичайно складною і, взагалі кажучи, неоднозначною процедурою. Для математичного опису поширення випромінювання крізь атмосферу зір необхід- но побудувати кінетичне рівняння для фотонів¹¹.

Розгляньмо нерухому атмосферу й підрахуємо швидкість змі- ни кількості фотонів із заданими хвильовим вектором і поляри- зацією ($q = \mathbf{k}, \alpha$) в околі деякої точки атмосфери:

$$\frac{dN_q}{dt} = \frac{\partial N_q}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)N_q. \quad (4.1)$$

Перший доданок у правій частині цього рівняння зумовлений не- стаціонарними процесами й описує зміну кількості фотонів за одиницю часу у фіксованій точці простору. Другий доданок дає зміну кількості фотонів унаслідок їхнього руху з однієї точки простору в іншу: $\mathbf{v} = \mathbf{ic}/n(\omega, \alpha)$ — швидкість фотонів у середо- вищі, $\mathbf{i} = \mathbf{k}/k$ — одиничний вектор у напрямку поширення світла, $n(\omega, \alpha)$ — показник заломлення атмосфери зорі.

З другого боку, величина dN_q/dt повинна дорівнювати зміні кількості фотонів за одиницю часу, зумовленій процесами “зітк- нення” фотонів з атомами середовища, тобто процесами погли- нання, випромінювання та розсіяння фотонів:

$$\left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}} = - \left\{ \begin{array}{l} \text{Імовірність зникнення} \\ \text{за одиницю часу фотона} \\ \text{з хвильовим вектором } \mathbf{k} \\ \text{й поляризацією } \alpha \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Імовірність поро-} \\ \text{дження за одиницю} \\ \text{часу фотона з хви-} \\ \text{льовим вектором } \mathbf{k} \\ \text{й поляризацією } \alpha \end{array} \right\}. \quad (4.2)$$

¹¹Кінетичне рівняння для фотонів, а фактично і весь основний матері- ал цього розділу, автор опублікував ще 1985 року як лекції для студентів- астрофізиків у Львівському університеті [14].

Прирівнюючи праві частини рівнянь (4.1) та (4.2), отримуємо кінетичне рівняння для фотонів у загальному вигляді:

$$\frac{\partial N_q}{\partial t} + \frac{c}{n(\omega, \alpha)} (\mathbf{i}\nabla) N_q = \left(\frac{dN_q}{dt} \right)_{\text{coll}}. \quad (4.3)$$

Це рівняння є фактично рівнянням Больцмана в кінетичній теорії, записане тут для фотонів. Права частина рівняння — так званий інтеграл зіткнень¹². Цю величину розраховують шляхом розгляду конкретних елементарних процесів з участю фотонів та обчисленням на основі (3.1), (3.6), (3.8) імовірностей відповідних квантових переходів.

У переважній більшості задач із вивчення процесів переносу випромінювання приймають наближення стаціонарної зоряної атмосфери з плоскопаралельною геометрією. Це пов'язано з тим, що товщина шару атмосфери більшості зір складає незначну частку від радіуса зорі. У цьому випадку фізичні величини, що характеризують атмосферу, змінюються лише в одному напрямку. Виберімо цей напрямок уздовж осі z (див. рис. 5). Коefіцієнт заломлення для негустої атмосфери покладімо рівним одиниці, $n(\omega, \alpha) = 1$, у разі потреби його можна легко відтворити в остаточних виразах. У результаті кінетичне рівняння значно спрощується:

$$\cos \theta \frac{dN_q}{dz} = \frac{1}{c} \left(\frac{dN_q}{dt} \right)_{\text{coll}}, \quad (4.4)$$

де θ — кут між напрямком поширення світла та віссю z .

Рівняння переносу інтенсивності променевої енергії отримуємо з кінетичного рівняння, підставляючи в нього зв'язок (2.2) між кількістю фотонів та інтенсивністю:

$$\cos \theta \frac{dI_q}{dz} = \hbar \left(\frac{\omega}{2\pi c} \right)^3 \left(\frac{dN_q}{dt} \right)_{\text{coll}}. \quad (4.5)$$

¹²Звідси позначення цієї величини індексом “coll”: від англійського *collision* — зіткнення, співудар, співударяння, удар.

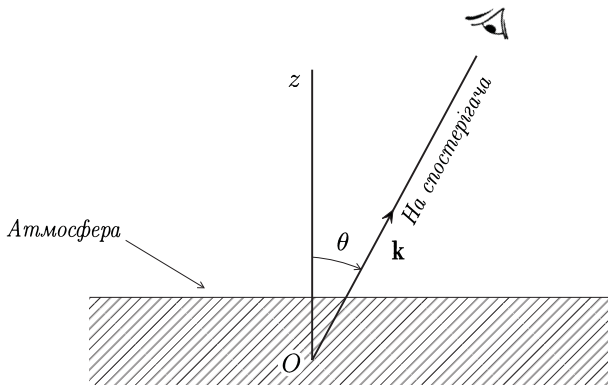


Рис. 5. Плоскопаралельна атмосфера. Початок відліку $z = 0$ може бути вибраний у будь-якій точці на осі z , уздовж якої змінюються фізичні параметри атмосфери (заштрихована ділянка).

Аналогічно можна записати рівняння переносу і для інших геометрій атмосфер. Розгляньмо, наприклад, сферично-симетричну атмосферу (див. рис. 6). Напрямок поширення світла візьмім уздовж осі z : $\mathbf{k} \parallel z$, тобто одиничний вектор $\mathbf{i} = \mathbf{k}/k = (0, 0, 1)$. Розпишемо у сферичних координатах

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

$$\theta = \arccos \left(z / \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right),$$

$$\varphi = \arctg(y/x),$$

оператор градієнта з (4.3)

$$(\mathbf{i}\nabla) = \frac{d}{dz} = \frac{dr}{dz} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{d\theta}{dz} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{d\varphi}{dz} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\frac{dr}{dz} = \cos \theta, \quad \frac{d\theta}{dz} = -\frac{\sin \theta}{r}, \quad \frac{d\varphi}{dz} = 0$$

і знайдемо кінетичне рівняння:

$$\cos \theta \frac{\partial I_q}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial I_q}{\partial \theta} = \hbar \left(\frac{\omega}{2\pi c} \right)^3 \left(\frac{dN_q}{dt} \right)_{\text{coll}}. \quad (4.6)$$

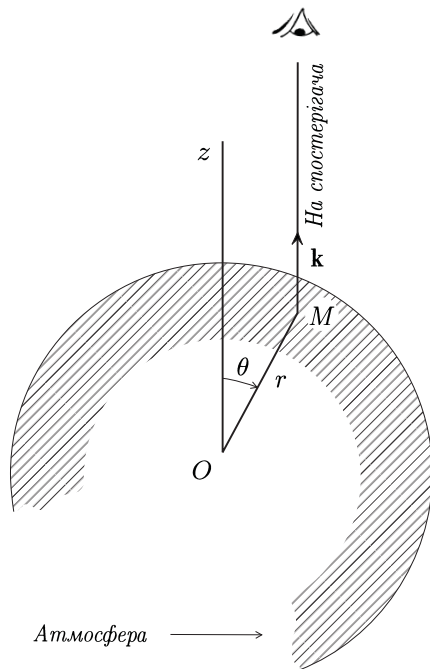


Рис. 6. Сферично-симетрична атмосфера. Початок координат вибрано в центрі зорі, зміна фізичних параметрів атмосфери починається з деякого значення радіус-вектора.

Перейдімо тепер до встановлення загального вигляду інтеграла зіткнень, тобто праві частини кінетичного рівняння. Розгляньмо спочатку однофотонні переходи (1.1)–(1.3). Нехай $|A\rangle$ є початковим станом електрона в полі всіх інших частинок речовини. Нехай далі величина ρ_A визначає ймовірність реалізації цього стану, причому

$$\sum_A \rho_A = 1. \quad (4.7)$$

Початковий стан поля фотонів зображаємо хвильовою функцією $|\dots, N_q, \dots\rangle$. Унаслідок взаємодії з електромагнітним полем електрон переходить у стан $|A'\rangle$, а кількість фотонів із кванто-

вим числом q для прямих реакцій (1.1)–(1.3) зменшується, для зворотних — збільшується на одиницю. Таким чином, кінцевий стан поля задається для прямих реакцій хвильовою функцією $|\dots, N_q - 1, \dots\rangle$, а для зворотних — $|\dots, N_q + 1, \dots\rangle$.

Величина ρ_A , яка задає заселеність атомних станів, своєю чергою визначається процесами міжчастинкових зіткнень і взаємодією електронів із фотонами. Для цієї величини ми повинні також записати рівняння кінетичного балансу. У стаціонарній зоряній атмосфері заселеність атомних рівнів у заданій точці є величиною постійною, $d\rho_A/dt = 0$. Якщо прийняти гіпотезу локальної термодинамічної рівноваги, то величина ρ_A визначається розподілом Гіббса:

$$\rho_A = Z^{-1} e^{-E_A/T}, \quad (4.8)$$

де статистична сума

$$Z = \sum_A e^{-E_A/T}. \quad (4.9)$$

Рівні енергії E_A й температура T , яку беремо в енергетичних одиницях, є функціями координат. Як ми вже зазначали, при вимірюванні температури в градусах Кельвіна величину T множимо на сталу Больцмана k_B ($T \rightarrow k_B T$).

Імовірність зникнення за одиницю часу фотона з квантовим числом q дорівнює, очевидно, імовірності квантового переходу (3.6) системи з початкового стану $|i\rangle = |A; \dots, N_q, \dots\rangle$ в кінцевий стан $|f\rangle = |A'; \dots, N_q - 1, \dots\rangle$, помноженій на величину ρ_A і підсумованій за всіма початковими й незайнятими кінцевими станами електрона (див. рис. 7):

$$\sum_{A, A'} \rho_A w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q - 1, \dots\rangle}.$$

Аналогічно величина

$$\sum_{A, A'} \rho_A w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q + 1, \dots\rangle}$$

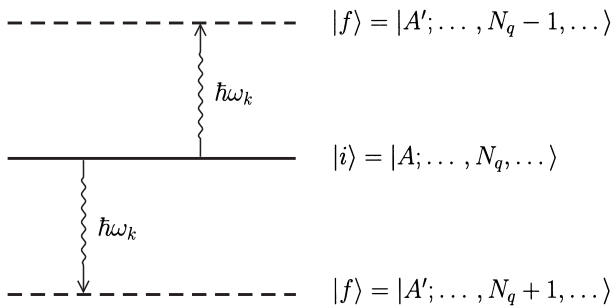


Рис. 7. Однофотонні переходи. З початкового стану $|i\rangle$ системи “атом плюс поле” відбувається квантовий перехід у кінцеві стани $|f\rangle$: переходи електрона в атомі “вверх” та “вниз” із поглинанням та випромінюванням фотона з енергією $\hbar\omega_k$.

дорівнює ймовірності народження за одиницю часу фотона з квантовим числом q . Таким чином, повна швидкість зміни кількості фотонів із заданими хвильовим вектором і поляризацією в наближенні однофотонних переходів

$$\left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}}^{(1)} = - \sum_{A,A'} \rho_A w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q - 1, \dots\rangle} + \sum_{A,A'} \rho_A w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q + 1, \dots\rangle}. \quad (4.10)$$

Цей вираз визначає внесок одного електрона. Повний внесок отримуємо підсумовуванням виразу (4.10) за всіма тими електронами, які, згідно з законом збереження енергії, можуть брати участь у реакціях (1.1)–(1.3) з фотоном заданої частоти. Як уже вказувалось, це можуть бути електрони у зв’язаних станах на атомах різних сортів, а також вільні електрони, що рухаються в полі йонів і атомів. Отже, для того щоб одержати повний вираз для швидкості зміни кількості фотонів із квантовим числом q , необхідно врахувати три канали реакцій (1.1)–(1.3) і взяти суму

за всіма сортами атомів та йонів:

$$\left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}}^{(1)} = - \sum_{\substack{\text{за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками}}} \sum_{A, A'} \rho_A \left(w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q-1, \dots\rangle} - w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q+1, \dots\rangle} \right). \quad (4.11)$$

Для простоти запису індекси сортів і номери каналів реакцій явно виписувати не будемо.

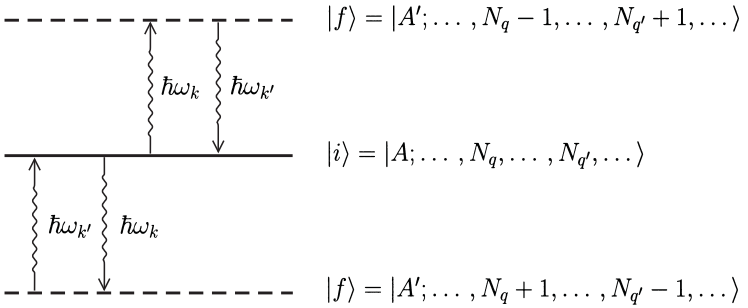


Рис. 8. Двофотонні переходи. З початкового стану $|i\rangle$ системи “атом плюс поле” відбувається квантовий перехід у кінцеві стани f : переходи електрона в атомі “вверх” та “вниз” із поглинанням фотона з енергією $\hbar\omega_k$ і випромінюванням фотона з енергією $\hbar\omega_{k'}$ та навпаки.

Перейдімо до встановлення інтеграла зіткнень для двофотонних переходів, тобто процесів розсіяння (1.4). Початковий стан системи “атоми плюс поле” зображаємо хвильовою функцією $|i\rangle = |A; \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots\rangle$, а кінцевий стан для реакції знищення фотона з квантовим числом q і народження фотона в стані q' дорівнює $|f\rangle = |A'; \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots\rangle$. Для зворотного процесу хвильова функція $|f\rangle = |A'; \dots, N_q + 1, \dots, N_{q'} - 1, \dots\rangle$. Схематично ці процеси зображено на рис. 8. Швидкість зміни кількості фотонів із квантовим числом q визначаємо аналогічно до однофотонних переходів з урахуванням того, що сума за ка-

налами реакцій тут зводиться до підсумовування за всіма квантовими числами q' розсіяних фотонів:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}}^{(2)} &= - \sum_{(\text{за частинками})} \sum_{A,A'} \sum_{q'} \rho_A \quad (4.12) \\ &\times \left(w_{|A;\dots,N_q,\dots,N_{q'},\dots\rangle \rightarrow |A';\dots,N_q-1,\dots,N_{q'}+1,\dots\rangle} \right. \\ &\left. - w_{|A;\dots,N_q,\dots,N_{q'},\dots\rangle \rightarrow |A';\dots,N_q+1,\dots,N_{q'}-1,\dots\rangle} \right). \end{aligned}$$

Повний інтеграл зіткнень визначаємо сумою виразів (4.11) та (4.12):

$$\left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}} = \left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}}^{(1)} + \left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}}^{(2)} + \dots \quad (4.13)$$

Крапками позначено внески від багатофотонних процесів, яких ми не будемо враховувати. Зауважимо лише, що права частина виразу (4.13) являє собою розклад за малим параметром — константою тонкої структури $e^2/\hbar c \simeq 1/137$. Іншими словами, імовірність, наприклад, двофотонних переходів (4.12), тобто процесів розсіяння, є на декілька порядків меншою, ніж імовірність однофотонних переходів — процесів поглинання. Винятком є так звана резонансна флюоресценція [10]. Крім того, зрозуміло, що однофотонні переходи дозволені вже в дипольному наближенні. Імовірність квадрупольних переходів є на декілька порядків меншою, ніж імовірність дипольних переходів, оскільки містить додатковий множник $(a/\lambda)^2$, де a — розміри атома. Нарешті зауважимо, що конкретне врахування наступних членів розкладу в (4.13) вимагає розгляду на основі релятивістської квантової теорії. Однак ми можемо не турбуватись щодо внесків багатофотонних переходів і не брати їх до уваги в теорії зоряних спектрів саме через їх зникаючу мализну.

§ 5. Інтеграл зіткнень для однофотонних переходів

Для встановлення явного вигляду рівняння переносу випромінювання з урахуванням лише процесів поглинання й випромінювання світла підрахуємо інтеграл зіткнень для однофотонних процесів. Почнімо з першого доданка в (4.11). Для ймовірності квантового переходу, згідно з (3.1), (3.6), маємо:

$$w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q - 1, \dots\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} \quad (5.1)$$

$$\times \left| \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots | - \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{p}}) | A; \dots, N_q, \dots \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i).$$

Другий доданок в операторі взаємодії (3.1), як відзначалось раніше, дає нульовий внесок для однофотонних переходів. У цьому можна переконатись безпосереднім розрахунком.

Матричний елемент

$$\begin{aligned} & \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots | - \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{p}}) | A; \dots, N_q, \dots \rangle = - \frac{e}{mc} \\ & \times \sum_{q'} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_{k'}} \right)^{1/2} \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots | \left(e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \hat{B}_{q'} + e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \hat{B}_{q'}^+ \right) \\ & \times (\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | A; \dots, N_q, \dots \rangle = - \frac{e}{mc} \sum_{q'} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_{k'}} \right)^{1/2} \quad (5.2) \\ & \times \left\{ \langle A' | e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} (\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \langle \dots, N_q - 1, \dots | B_{q'} | \dots, N_q, \dots \rangle \right. \\ & \left. + \langle A' | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} (\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \langle \dots, N_q - 1, \dots | B_{q'}^+ | \dots, N_q, \dots \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Матричні елементи операторів породження і знищення фотонів легко визначити за допомогою рівнянь (3.3) та умови ортогональ-

ності хвильових функцій поля,

$$\langle \dots, N'_q, \dots | \dots, N_q, \dots \rangle = \prod_q \delta_{N'_q, N_q}. \quad (5.3)$$

Отже,

$$\begin{aligned} \langle \dots, N_q - 1, \dots | B_{q'}^+ | \dots, N_q, \dots \rangle &= 0, \\ \langle \dots, N_q - 1, \dots | B_{q'} | \dots, N_q, \dots \rangle &= \delta_{q'q} \sqrt{N_q}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Підставляючи вирази (5.4) в (5.2), отримаємо

$$\begin{aligned} \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots | -\frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{p}}) | A; \dots, N_q, \dots \rangle \\ = -\frac{e}{mc} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_k} N_q \right)^{1/2} \langle A' | e^{i\mathbf{kr}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle, \end{aligned} \quad (5.5)$$

де матричний елемент

$$\langle A' | e^{i\mathbf{kr}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle = \mathbf{e}_q \int \psi_{A'}^*(\xi) e^{i\mathbf{kr}} \hat{\mathbf{p}} \psi_A(\xi) d\xi. \quad (5.6)$$

Розгляньмо тепер аргумент дельта-функції в рівнянні (5.1). Енергія початкового стану дорівнює сумі енергій електрона й поля фотонів:

$$E_i = E_A + \sum_{\substack{q' \\ (q' \neq q)}} \hbar \omega_{k'} \left(N_{q'} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_k \left(N_q + \frac{1}{2} \right),$$

де ми виділили внесок в енергію поля фотонів із квантовим числом q . І тому

$$E_f = E_{A'} + \sum_{\substack{q' \\ (q' \neq q)}} \hbar \omega_{k'} \left(N_{q'} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_k \left(N_q - 1 + \frac{1}{2} \right).$$

Отже, різниця

$$E_f - E_i = E_{A'} - E_A - \hbar\omega_k, \quad (5.7)$$

а дельта-функція забезпечує закон збереження енергії в процесі поглинання світла.

Підставмо (5.5), (5.7) в (5.1):

$$w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q - 1, \dots\rangle} = \left(\frac{2\pi e}{m} \right)^2 \frac{N_q}{V\omega_k} \\ \times \left| \langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2 \delta(E_{A'} - E_A - \hbar\omega_k). \quad (5.8)$$

Отож, імовірність поглинання фотонів із заданим хвильовим вектором \mathbf{k} і поляризацією α пропорційна до їх кількості N_q в цьому стані.

Перейдімо до розрахунку другого доданка в правій частині виразу (4.11), який описує процес випромінювання фотонів. У цьому випадку необхідні матричні елементи операторів породження і знищення фотонів також знаходимо за допомогою (3.3) та (5.3):

$$\langle \dots, N_q + 1, \dots | B_{q'}^+ | \dots, N_q, \dots \rangle = \delta_{q',q} \sqrt{N_q + 1}, \\ \langle \dots, N_q + 1, \dots | B_{q'} | \dots, N_q, \dots \rangle = 0. \quad (5.9)$$

Різницю енергій у кінцевому й початковому станах

$$E_f - E_i = E_{A'} - E_A + \hbar\omega_k \quad (5.10)$$

вираховуємо аналогічно до попереднього. За допомогою виразів (5.9), (5.10) знаходимо ймовірність квантового переходу за одиницю часу з народженням фотона:

$$w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q + 1, \dots\rangle} = \left(\frac{2\pi e}{m} \right)^2 \frac{N_q + 1}{V\omega_k} \\ \times \left| \langle A' | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2 \delta(E_{A'} - E_A + \hbar\omega_k). \quad (5.11)$$

Як бачимо, цей вираз складається із суми двох доданків: першого, пропорційного до N_q , який описує індуковане випромінювання фотонів, і другого доданка, який не рівний нулеві і за відсутності фотонів, $N_q = 0$, описує спонтанне випромінювання світла. Зауважимо, між іншим, що спонтанне випромінювання зумовлене процесами взаємодії електрона з нульовими коливаннями електромагнітного поля. Саме ця взаємодія є причиною квазістаціонарності збуджених атомних станів і, урешті-решт, формує природну ширину спектральних ліній.

Підставмо вирази (5.8), (5.11) в (4.11) і в другому доданку поміняймо місцями індекси підсумовування за станами A , A' . Далі скористаємось тим, що δ -функція є парною,

$$\delta(E_{A'} - E_A - \hbar\omega_k) = \delta(E_A - E_{A'} + \hbar\omega_k),$$

а матричний елемент має таку властивість щодо операції комплексного спряження:

$$\langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A' \rangle = \langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle^*.$$

Цю рівність можна легко довести. Справді, за означенням

$$\langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A' \rangle = \int \psi_A^*(\xi) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) \psi_{A'}(\xi) d\xi.$$

Тепер пригадаймо, що $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, і інтегруймо частинами (тобто введімо оператор, транспонований до оператора імпульсу $\hat{\tilde{\mathbf{p}}} = -\hat{\mathbf{p}}$). У результаті перекидаємо дію оператора імпульсу наліво:

$$\langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A' \rangle = - \int \psi_{A'}(\xi) (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi_A^*(\xi) d\xi.$$

Оскільки з умови поперечності поля $(\mathbf{e}_q \mathbf{k}) = 0$ випливає, що

$$(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = -\hbar(\mathbf{e}_q \mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}),$$

то наш матричний елемент з урахуванням того, що $\hat{\mathbf{p}}^* = -\hat{\mathbf{p}}$, дорівнює

$$\langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A' \rangle = - \int \psi_{A'}(\xi) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) \psi_A^*(\xi) d\xi$$

$$= \left(\int \psi_{A'}^*(\xi) e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) \psi_A(\xi) d\xi \right)^* = \langle A' | e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle^*.$$

Отже, ми отримали шукану рівність, з якої випливає таке співвідношення:

$$\left| \langle A | e^{-i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A' \rangle \right|^2 = \left| \langle A' | e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2.$$

Після всього з урахуванням цих міркувань ми можемо записати інтеграл зіткнень (4.11) так:

$$\left(\frac{dN_q}{dt} \right)_{\text{coll}}^{(1)} = \left(\frac{2\pi e}{m} \right)^2 \frac{1}{V\omega_k} \sum_{\left(\begin{smallmatrix} \text{за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками} \end{smallmatrix} \right)} \sum_{A, A'} \left| \langle A' | e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2 \times \{ -\rho_A N_q + \rho_{A'} (N_q + 1) \} \delta(E_{A'} - E_A - \hbar\omega_k). \quad (5.12)$$

Уведемо скорочене позначення для безрозмірної величини, яка характеризує інтенсивність квантових переходів між атомними станами:

$$f_{A'A}(q) = \frac{2}{m\hbar\omega_{A'A}} \left| \langle A' | e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2, \quad (5.13)$$

де частота переходу

$$\omega_{A'A} = (E_{A'} - E_A)/\hbar. \quad (5.14)$$

Аргумент дельта-функції в (5.12) запишімо через частоту переходу, використовуючи добре відому властивість

$$\delta[\hbar(\omega_{A'A} - \omega_k)] = \hbar^{-1} \delta(\omega_{A'A} - \omega_k).$$

У результаті, після деяких елементарних перегрупувань у фігурних дужках (5.12), інтеграл зіткнень набуває остаточного вигляду:

$$\left(\frac{dN_q}{dt} \right)_{\text{coll}}^{(1)} = -\frac{2\pi^2 e^2}{m} \frac{1}{V} \sum_{\left(\begin{smallmatrix} \text{за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками} \end{smallmatrix} \right)} \sum_{A, A'} \rho_A (1 - \rho_{A'} / \rho_A)$$

$$\times f_{A'A}(q) \left\{ N_q - \frac{1}{\rho_A/\rho_{A'} - 1} \right\} \delta(\omega_{A'A} - \omega), \quad (5.15)$$

$$\omega = \omega_k.$$

Легко пересвідчитись, що інтеграл зіткнень перетворюється в нуль, якщо кількість фотонів N_q дорівнює їхньому середньому значенню

$$\langle N_q \rangle = \frac{1}{\rho_A/\rho_{A'} - 1}, \quad (5.16)$$

яке при рівноважній заселеності атомів за станами збігається з розподілом Бозе–Айнштейна для фотонів:

$$\langle N_q \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}. \quad (5.17)$$

Далі ми пересвідчимось, що ця властивість інтеграла зіткнень зберігається природно і у вищих наближеннях.

§ 6. Рівняння переносу випромінювання в наближенні однофотонних переходів

Зупинімось на рівнянні переносу (4.5) для плоскопаралельної атмосфери. Підставляючи в нього одержаний вираз (5.15) для інтеграла зіткнень і враховуючи зв'язок (2.2) між кількістю фотонів N_q та інтенсивністю світла I_q , приходимо до такого рівняння:

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI_q}{dz} = & - \frac{2\pi^2 e^2}{mcV} \sum_{\substack{\text{(за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками)}}} \sum_{AA'} f_{A'A}(q) \delta(\omega_{A'A} - \omega) \\ & \times \rho_A (1 - \rho_{A'}/\rho_A) \{ I_q - S_{AA'}(\omega) \}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

де вираз

$$S_{AA'}(\omega) = \frac{\hbar}{c^2} \left(\frac{\omega}{2\pi} \right)^3 / (\rho_A/\rho_{A'} - 1) \quad (6.2)$$

називають функцією джерела для $A \rightarrow A'$ переходу. Назва пов'язана з тим, що доданок із цією функцією в правій частині рівняння переносу (6.1) має додатний знак і описує збільшення інтенсивності світла в міру його проходження крізь зоряну атмосферу за рахунок спонтанного висвічування атомів, які перебувають у збуджених станах.

Перший доданок у (6.1), пропорційний до інтенсивності, дає внесок зі знаком мінус й описує поглинання світла при його поширенні крізь середовище атмосфери зорі. Коефіцієнт поглинання світла $\kappa(q)$, за означенням, є множником біля інтенсивності I_q (зі знаком "мінус") у рівнянні переносу і, як випливає з (6.1), дорівнює:

$$\begin{aligned} \kappa(q) = & \frac{2\pi^2 e^2}{mcV} \sum_{\left(\begin{array}{c} \text{за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками} \end{array} \right)} \sum_{AA'} \rho_A f_{A'A}(q) \\ & \times \left(1 - \frac{\rho_{A'}}{\rho_A} \right) \delta(\omega_{A'A} - \omega). \end{aligned} \quad (6.3)$$

Він має розмірність, обернену до довжини, і залежить від частоти ω , поляризації α і кутів Ω : $\kappa(q) = \kappa(\omega, \alpha, \Omega)$. Величина, обернена до коефіцієнта поглинання $\kappa(q)^{-1}$, має зміст довжини вільного пробігу фотона в середовищі.

Поглинання світла дещо послаблюється за рахунок вимушеного випромінювання, яке враховує множник $(1 - \rho_{A'}/\rho_A)$. Зауважимо, що при інверсії заселеності квантових станів атомів, $\rho_{A'} > \rho_A$, замість послаблення світла, будемо мати його підсилення (лазер).

Якщо виконуються умови локальної термодинамічної рівноваги, коли заселеність атомних станів визначається розподілом Гіббса (4.8), рівняння переносу значно спрощується. Справді, у цьому випадку при наявності дельта-функції виконується співвідношення:

$$\rho_{A'}/\rho_A = e^{-(E_{A'} - E_A)/T} = e^{-\hbar\omega/T}. \quad (6.4)$$

Унаслідок цього відносна заселеність станів не залежить від індексів станів і її можна винести з-під знаків суми в (6.1). У результаті маємо рівняння переносу випромінювання в такому вигляді:

$$\cos \theta \frac{dI_q}{dz} = -\kappa(q)[I_q - B_{\omega, \alpha}(T)], \quad (6.5)$$

де коефіцієнт поглинання

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2}{mcV} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \\ &\times \sum_{\substack{\text{за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками}}} \sum_{AA'} \rho_{AA'} f_{AA'}(q) \delta(\omega_{AA'} - \omega), \end{aligned} \quad (6.6)$$

а функція джерела (6.2) збігається з функцією Планка для рівноважного розподілу інтенсивності чорного випромінювання за частотами для фіксованої поляризації (тобто рівноважного електромагнітного випромінювання абсолютно чорного тіла)¹³:

$$B_{\omega, \alpha}(T) = S_{AA'}(\omega) = \frac{\hbar}{c^2} \left(\frac{\omega}{2\pi} \right)^3 \Big/ (e^{\hbar\omega/T} - 1). \quad (6.7)$$

¹³Цю формулу Макс Планк (1858–1947) вперше навів 19 жовтня 1900 року на засіданні Німецького фізичного товариства в Берліні. Він запропонував інтерполяційний вираз для другої похідної за енергією від ентропії електромагнітного випромінювання, використовуючи для високих частот закон В. Віна (1864–1928), а для низьких — результати експериментальних вимірів, які представили Ф. Курльбаум (1857–1927) і Г. Рубенс (1865–1922) на цьому ж засіданні. Мікроскопічне обґрунтування цього виразу М. Планк подав на засіданні Товариства 14 грудня 1900 року. Працюючи впродовж майже двох місяців, він дійшов висновку, що формулу для інтенсивності чорного випромінювання можна довести, якщо припустити, що енергія випромінюється і поглинається квантами величиною $\hbar\omega$. Так в обіг була введена фундаментальна константа \hbar , яка змінила наш світогляд і наше життя, 14 грудня 1900 року вважаємо днем народження квантової фізики. (І. О. Вакарчук. Квант — геніальна здогадка чи вимушений крок? // Світ фізики.— №4(12).— 2000; Журнал фізичних досліджень.— Т. 5.— №1.— 2001.)

Як уже вказувалось, права частина рівняння (6.5), тобто інтеграл зіткнень, перетворюється в нуль, якщо інтенсивність I_q дорівнює середній інтенсивності (6.7).

Якщо зручніше користуватись інтенсивністю випромінювання за шкалою довжин хвиль, то, згідно з (2.6), рівняння переносу (6.5) набуває такого вигляду:

$$\cos \theta, \frac{dI(\lambda, \alpha, \Omega)}{dz} = -\varkappa_\lambda(\alpha, \Omega)[I(\lambda, \alpha, \Omega) - B_{\lambda, \alpha}(T)], \quad (6.8)$$

де функція Планка

$$B_{\lambda, \alpha}(T) = \frac{2\pi c^2 \hbar}{\lambda^5} \frac{1}{e^{2\pi c \hbar / \lambda T} - 1}, \quad (6.9)$$

а коефіцієнт поглинання визначається тим же виразом (6.6), $\varkappa_\lambda(\alpha, \Omega) = \varkappa(q)$, причому частота $\omega = 2\pi c / \lambda$.

Ще раз підкреслимо, що розглядаємо випромінювання із заданою поляризацією. Для неполяризованого світла в (6.5) або (6.8) необхідно взяти суму за $\alpha = 1, 2$. При нехтуванні залежністю коефіцієнта поглинання від поляризації α , що, як правило, і приймається, рівняння (6.5), (6.8) свого вигляду не змінюють, а в правій частині функції Планка (6.7) або (6.9) виникає додатковий множник 2.

Рівняння (6.8) ми отримали на основі мікроскопічного підходу, виходячи з перших принципів квантової механіки. Його феноменологічне виведення, зрозуміло без явного вигляду коефіцієнта поглинання (в такому підході це є окремою задачею), можна знайти в уже згаданих монографіях та підручниках [1–7], а також в [15–17].

Знайдений вираз для коефіцієнта поглинання (6.3) є вихідним при фактичних розрахунках як для неперервного поглинання, так і для поглинання в спектральних лініях. Коефіцієнт неперервного поглинання формується зв'язано-вільними (1.2) та вільно-вільними (1.3) переходами. Зв'язано-зв'язані переходи (1.1) створюють коефіцієнт поглинання в спектральній лінії. Причому оскільки квантові числа A, A' задають електронні стани з урахуванням взаємодії з навколишніми частинками, то з виразу (6.3)

без будь-яких додаткових припущень вираховують усі ефекти розширення профілю коефіцієнта поглинання.

Як випливає з (6.3), коефіцієнт поглинання в лінії для ізольованого атома має безмежно вузький дельтаподібний профіль. Це пов'язано з нехтуванням природною шириною спектральних ліній, тобто з неврахуванням квазістаціонарності збуджених станів, яка розмиває дельта-функцію. Для врахування цього ефекту при розв'язуванні рівняння Шредингера системи "поле плюс частинки" вже недостатньо використати звичайну теорію збурень. Це питання розглянемо нижче.

Вираз (6.3) для коефіцієнта поглинання, зрозуміло, має загальний характер і не обмежений застосуванням саме до зоряних атмосфер частково йонізованого газу. Його можна використовувати для розрахунку поглинання світла в рідинах і твердих тілах. Для конденсованих систем необхідно лише відтворити в (6.3) залежність від показника заломлення $n(\omega, \alpha)$. Це легко зробити, взявши до уваги, що у виразі для векторного потенціалу (3.2) швидкість світла c необхідно замінити на $c/n(\omega, \alpha)$. Таким чином, імовірності переходу (5.8), (5.11) дістануть додатковий множник $1/n^2(\omega, \alpha)$.

§ 7. Інтеграл зіткнень для процесів розсіяння

Розрахунок інтеграла зіткнень (4.12) почнемо з обчислення ймовірностей переходу. Оскільки мова йде про двофотонні переходи (1.4), то в першому порядку теорії збурень внесок у ймовірність переходу від першого члена в операторі взаємодії (3.1), який змінює кількість фотонів на одиницю, дорівнює нулеві. Ненульовий внесок у першому порядку теорії збурень дає другий доданок в операторі (3.1), квадратичний за вектор-потенціалом поля $\hat{\mathbf{A}}$. Водночас ми повинні врахувати другий порядок теорії збурень із першим членом оператора (3.1). Він також дасть величину, квадратичну за $\hat{\mathbf{A}}$. Іншими словами, для ймовірності переходу використовуємо вираз (3.8), який в нашому випадку

набуває вигляду:

$$w_{|i\rangle\rightarrow|f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{2mc^2} (\hat{\mathbf{A}}^2)_{fi} \right. \quad (7.1)$$

$$\left. + \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \sum_{\substack{f' \\ (f' \neq i)}} \frac{(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{ff'} (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{f'i}}{E_i - E_{f'}} \right|^2 \delta(E_f - E_i).$$

Таким чином, ми коректно враховуємо в імовірності переходу внески від величин порядку квадрата константи тонкої структури $(e^2/\hbar c)^2$.

Перейдімо до розрахунку необхідних матричних елементів. Розгляньмо спочатку процес знищення фотона з квантовим числом q . Для першого доданка під знаком модуля в (7.1) маємо:

$$(\hat{\mathbf{A}}^2)_{fi} = \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{\mathbf{A}}^2 | A; \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle$$

$$= \frac{2\pi c^2 \hbar}{V} \sum_{q_1} \sum_{q_2} (\omega_{k_1} \omega_{k_2})^{-1/2} (\mathbf{e}_{q_1} \mathbf{e}_{q_2})$$

$$\times \left\{ \langle A' | e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{r}} | A \rangle \quad (7.2)$$

$$\times \langle \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{B}_{q_1} \hat{B}_{q_2}^+ | \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle$$

$$+ \langle A' | e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{r}} | A \rangle$$

$$\times \langle \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{B}_{q_1}^+ \hat{B}_{q_2} | \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle \left. \right\}.$$

Матричні елементи добутків операторів $\hat{B}_{q_1} \hat{B}_{q_2}$ та $\hat{B}_{q_1}^+ \hat{B}_{q_2}^+$ для аналізованого процесу дорівнюють нулеві, вони відмінні від нуля для процесів знищення або народження двох фотонів. Матричні

елементи, що входять у (7.2), розраховуємо для $q' \neq q$, оскільки розглядаємо процес розсіяння. Використовуючи (3.3), отримуємо:

$$\begin{aligned}
 & \langle \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{B}_{q_1} \hat{B}_{q_2}^+ | \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle \\
 &= \sqrt{N_{q_1} (N_{q_2} + 1)} \delta_{q_1, q} \delta_{q_2, q'}, \\
 & \langle \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{B}_{q_1}^+ \hat{B}_{q_2} | \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle \\
 &= \sqrt{N_{q_2} (N_{q_1} + 1)} \delta_{q_2, q} \delta_{q_1, q'}. \tag{7.3}
 \end{aligned}$$

Підставляючи ці вирази в (7.2), маємо:

$$(\hat{\mathbf{A}}^2)_{fi} = \frac{4\pi c^2}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \sqrt{\frac{N_q (N_{q'} + 1)}{\omega_k \omega_{k'}}} \langle A' | e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}} | A \rangle. \tag{7.4}$$

Різницю енергій $E_f - E_i$, яка входить у (7.1), підраховуємо так само, як це робилось при одержанні виразу (5.7):

$$E_f - E_i = E_{A'} - E_A + \hbar\omega_{k'} - \hbar\omega_k. \tag{7.5}$$

Розгляньмо тепер другий порядок теорії збурень. Індекс проміжного підсумовування f' в (7.1) відповідає проміжному станові системи “атоми плюс електромагнітне поле” $|f'\rangle = |C; \dots, N'_{q'}, \dots\rangle$, де $|C\rangle$ — проміжні квантові стани атомної системи. Набір чисел $N'_{q'}$, які фіксують проміжні стани поля, не може бути довільним. Це пов'язано з тим, що початковий і кінцевий стани поля ми задаємо і при розрахунку матричних елементів оператора $\hat{\mathbf{A}}$, який змінює кількість фотонів на одиницю, лише окремі проміжні стани поля дають ненульовий внесок. Простий аналіз показує, що таких станів є два. У досліджуваному процесі знищення фотона — це стани $|\dots, N_q - 1, \dots, N_{q'}, \dots\rangle$ та $|\dots, N_q, \dots, N_{q'} + 1, \dots\rangle$. Підрахунок матричних елементів виконуємо аналогічно до попередніх викладок.

Випишемо результат для необхідних матричних елементів із першим проміжним станом:

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{f'i} &= \\
 &= \langle C; \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'}, \dots | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} | A; \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle \\
 &= \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_k} N_q \right)^{1/2} \langle C | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle, \tag{7.6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{ff'} &= \\
 &= \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} | C; \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'}, \dots \rangle \\
 &= \left[\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_{k'}} (N_{q'} + 1) \right]^{1/2} \langle A' | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} (\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | C \rangle.
 \end{aligned}$$

Відповідні закони збереження енергії:

$$\begin{aligned}
 E_i - E_{f'} &= E_A - E_C + \hbar \omega_k, \\
 E_f - E_{f'} &= E_{A'} - E_C + \hbar \omega_{k'}, \\
 E_f - E_i &= E_{A'} - E_A + \hbar \omega_{k'} - \hbar \omega_k.
 \end{aligned} \tag{7.7}$$

Для другого проміжного стану матричні елементи

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{f'i} &= \\
 &= \langle C; \dots, N_q, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} | A; \dots, N_q, \dots, N_{q'}, \dots \rangle \\
 &= \left[\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_{k'}} (N_{q'} + 1) \right]^{1/2} \langle C | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} (\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle, \tag{7.8}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{ff'} &= \\
 &= \langle A'; \dots, N_q - 1, \dots, N_{q'} + 1, \dots | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} | C; \dots, N_q, \dots, N_{q'} + 1, \dots \rangle
 \end{aligned}$$

$$= \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_k} N_q \right)^{1/2} \langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | C \rangle.$$

І закони збереження енергії:

$$\begin{aligned} E_i - E_{f'} &= E_A - E_C - \hbar\omega_{k'}, \\ E_f - E_{f'} &= E_{A'} - E_C - \hbar\omega_k, \\ E_f - E_i &= E_{A'} - E_A + \hbar\omega_{k'} - \hbar\omega_k. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Отже, маючи внесок цих двох проміжних станів фотонного поля, знаходимо величину

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{f' \\ (f' \neq i)}} \frac{(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{ff'}(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}})_{f'i}}{E_i - E_{f'}} &= \frac{2\pi c^2 \hbar}{V} \left[\frac{N_q(N_{q'} + 1)}{\omega_k \omega_{k'}} \right]^{1/2} \\ &\times \sum_C \left\{ \frac{\langle A' | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}(\mathbf{e}_{q'}\hat{\mathbf{p}}) | C \rangle \langle C | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\mathbf{e}_q\hat{\mathbf{p}}) | A \rangle}{E_A - E_C + \hbar\omega_k} \right. \\ &\left. + \frac{\langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\mathbf{e}_q\hat{\mathbf{p}}) | C \rangle \langle C | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}(\mathbf{e}_{q'}\hat{\mathbf{p}}) | A \rangle}{E_A - E_C - \hbar\omega_{k'}} \right\}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Підставмо вирази (7.4) та (7.10) в (7.1) і врахуймо закони збереження енергії (7.5), (7.7), (7.9). У результаті отримаємо вираз імовірності переходу в одиницю часу для процесу знищення фотона з квантовим числом q , тобто перший член у дужках правій частині рівняння (4.12):

$$\begin{aligned} w_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} &= \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m} \right)^2 \frac{N_q(N_{q'} + 1)}{\omega_k \omega_{k'}} \Phi_{A'A}(q, q') \\ &\times \delta(\omega_{A'A} + \omega_{k'} - \omega_k), \end{aligned} \quad (7.11)$$

де величини

$$\Phi_{A'A}(q, q') = \left| (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \langle A' | e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} | A \rangle \right|$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{m\hbar} \sum_C \left(\frac{\langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | C \rangle \langle C | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}(\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle}{\omega_{AC} - \omega_{k'}} \right. \\
& \left. + \frac{\langle A' | e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}(\mathbf{e}_{q'} \hat{\mathbf{p}}) | C \rangle \langle C | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle}{\omega_{AC} + \omega_k} \right) \Bigg|^2. \quad (7.12)
\end{aligned}$$

При одержанні виразу (7.11) аргумент дельта-функції перепи- саний через частоту переходу, для якої зберігаємо позначення (5.14).

Функція $\Phi_{A'A}(q, q')$ відіграє в процесах розсіяння таку ж роль, як і функція $f_{A'A}(q)$, що дається виразом (5.13), у процесах по- глинання. Вони кількісно характеризують імовірність квантових переходів для самої атомної системи й визначаються її природою та фізичним станом.

Імовірність процесу народження фотона з квантовим числом q і знищення фотона з квантовим числом q' , тобто другий дода- нок у дужках правої частини рівняння (4.12), отримаємо з (7.11) простою заміною $q \rightarrow q'$:

$$\begin{aligned}
w_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} &= \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m} \right)^2 \frac{N_{q'}(N_q + 1)}{\omega_k \omega_{k'}} \Phi_{A'A}(q', q) \\
&\times \delta(\omega_{A'A} + \omega_k - \omega_{k'}). \quad (7.13)
\end{aligned}$$

Підставмо нарешті вирази (7.11), (7.13) у праву частину (4.12), причому в другому доданку зробимо заміну $A \rightarrow A'$ і скориста- ємось міркуваннями, які ми висловили перед виведенням фор- мули (5.12) для інтеграла зіткнень у наближенні однофотонних переходів. А саме, знову використаємо парність δ -функції в (7.13) і властивість матричного елемента:

$$\langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A' \rangle = \langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle^*,$$

за допомогою якої неважко пересвідчитись у тому, що функція (7.12) має такі властивості симетрії:

$$\Phi_{A'A}(q, q') = \Phi_{AA'}(q', q).$$

З урахуванням цього знаходимо остаточний вираз для інтеграла зіткнень, що описує процес розсіяння (1.4):

$$\begin{aligned} \left(\frac{dN_q}{dt}\right)_{\text{coll}}^{(2)} &= -\frac{1}{V} \sum_{\text{(за частинками)}} \frac{(2\pi)^3}{V} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \sum_{q'} \sum_{A,A'} \rho_A \\ &\times \frac{1}{\omega_k \omega_{k'}} \Phi_{A'A}(q, q') \delta(\omega_{A'A} + \omega_{k'} - \omega_k) \quad (7.14) \\ &\times \left\{ N_q(N_{q'} + 1) - N_{q'}(N_q + 1) \rho_{A'} / \rho_A \right\}. \end{aligned}$$

Інтеграл зіткнень (7.14) перетворюється в нуль для рівноважного розподілу фотонів. У цьому легко переконатись, підставляючи явний вираз для середніх чисел заповнення фотонів $\langle N_q \rangle = 1/(e^{\hbar\omega_k/T} - 1)$ і враховуючи, що поруч з дельта-функцією відношення $\rho_{A'}/\rho_A = \exp\{-\hbar(\omega_k - \omega_{k'})/T\}$, оскільки при цьому $\omega_{A'A} = \omega_k - \omega_{k'}$.

Можна міркувати інакше. З умови рівності нулевих інтеграла зіткнень знайдемо рівноважний розподіл для фотонів, якщо розподіл атомів за станами є рівноважним:

$$N_q(N_{q'} + 1) - N_{q'}(N_q + 1) \rho_{A'} / \rho_A = 0 \quad (7.15)$$

або

$$\frac{N_q}{N_q + 1} \frac{N_{q'} + 1}{N_{q'}} = \frac{\rho_{A'}}{\rho_A}, \quad (7.16)$$

тобто

$$\frac{N_q}{N_q + 1} \frac{N_{q'} + 1}{N_{q'}} = e^{-\hbar(\omega_k - \omega_{k'})/T}. \quad (7.17)$$

Прирівнюючи зліва і справа в цьому функціональному співвідношенні штриховані і нештриховані величини, маємо:

$$\frac{N_q}{N_q + 1} = e^{-\hbar\omega_k/T}, \quad (7.18)$$

$$\frac{N_{q'} + 1}{N_{q'}} = e^{\hbar\omega_{k'}/T}. \quad (7.19)$$

Звідси випливає, що $N_q = \langle N_q \rangle$ і отже, числа заповнення фотонів є рівноважними.

§ 8. Рівняння переносу випромінювання з урахуванням процесів поглинання й розсіяння

Розгляньмо випадок плоскопаралельної атмосфери. Інтеграл зіткнень (4.13), що входить у праву частину рівняння переносу (4.5), визначений виразами (5.15), (7.14), що описують відповідно однофотонні та двофотонні процеси. З урахуванням цих виразів рівняння переносу набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI_q}{dz} &= -\frac{2\pi^2 e^2}{mcV} \sum_{\substack{\text{за каналами} \\ \text{реакцій та за} \\ \text{частинками}}} \sum_{AA'} f_{A'A}(q) \delta(\omega_{A'A} - \omega) \\ &\times \rho_A (1 - \rho_{A'}/\rho_A) \{I_q - S_{AA'}(\omega)\} \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\text{за частинками}} \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{q'} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{1}{c\omega\omega'} \\ &\times \sum_{A,A'} \rho_A \Phi_{A'A}(q, q') \delta(\omega_{A'A} + \omega' - \omega) \\ &\times \left\{ I_q (N_{q'} + 1) - \left(\frac{\omega}{\omega'}\right)^3 I_{q'} (N_q + 1) \rho_{A'}/\rho_A \right\}. \end{aligned} \quad (8.1)$$

Числа заповнення для фотонів N_q , $N_{q'}$ пов'язані з інтенсивністю співвідношенням (2.2), а частоти $\omega = \omega_k$, $\omega' = \omega_{k'}$.

Рівняння (8.1) отримане в припущенні, що вищі наближення в інтегралі зіткнень (4.13) є малими. Це справді так, оскільки

внесок цих наближень пропорційний до квадрата сталої тонкої структури $(e^2/\hbar c)^2 \simeq (1/137)^2$ і на декілька порядків менший від внеску однофотонних переходів в інтеграл зіткнень. Похибки експериментальних профілів спектральних ліній значно перевищують неточності теорії, які пов'язані з неврахуванням багатифотонних процесів. Таким чином, рівняння (8.1) фактично є тим центральним рівнянням теорії переносу випромінювання, яке дає змогу вилучати величезний обсяг інформації зі спостережуваних зоряних спектрів.

Особливістю цього рівняння є його нелінійність — права частина рівняння містить доданки $\sim I_q I_{q'}$. Пригадаймо, що інтенсивність випромінювання I_q пропорційна до чисел заповнення фотонів N_q відповідно до рівняння (2.2). В окремих випадках роль нелінійних ефектів може бути важливою, і ми повернемося до обговорення цього питання в кінці параграфа.

Феноменологічне виведення рівняння переносу виключає можливість урахувати нелінійні доданки з ідентифікованим змістом коефіцієнтів біля добутку $I_q I_{q'}$. Нелінійні ефекти є незначними, коли числа заповнення фотонів малі, $N_q \ll 1$. Оцінити умови виконання цієї нерівності можна, скориставшись середнім значенням чисел заповнення для рівноважного випромінювання (5.17), $\exp(-\hbar\omega/T) \ll 1$, $\hbar\omega/T \gg 1$. Це означає, що заселеність збуджених атомних станів є малою порівняно із заселеністю основного стану. Якщо така умова виконується, то рівняння (8.1) можна злінеаризувати.

Отже, приймаємо, по-перше, що $N_q \ll 1$. По-друге, вважаємо також, що в зоряній атмосфері виконуються умови локальної термодинамічної рівноваги, коли заселеність атомних станів визначається розподілом Гіббса (4.8). Нарешті, переходимо в рівнянні (8.1) від суми за \mathbf{k}' до інтеграла за частотами й кутовими змінними згідно з (3.5):

$$\frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{q'} \rightarrow \sum_{\alpha'} \int d\mathbf{k}' = \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^{\infty} k'^2 dk'$$

$$= \frac{1}{c^3} \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^{\infty} \omega'^2 d\omega'. \quad (8.2)$$

У результаті рівняння (8.1) значно спрощується і набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI_q}{dz} = & - \left[\kappa(q) + \sigma(q) \right] I_q + \kappa(q) B_{\omega, \alpha}(T) \\ & + \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^{\infty} d\omega' \left(\frac{\omega}{\omega'} \right)^3 e^{-\hbar(\omega - \omega')/T} R(q, q') I_{q'}, \end{aligned} \quad (8.3)$$

де величина

$$\begin{aligned} R(q, q') = & \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{\omega'}{\omega V} \sum_{\text{(за частинками)}} \sum_{A, A'} \\ & \times \rho_A \Phi_{A' A}(q, q') \delta(\omega_{A' A} + \omega' - \omega) \end{aligned} \quad (8.4)$$

є так званою функцією перерозподілу фотонів за частотами. Величина

$$\sigma(q) = \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^{\infty} d\omega' R(q, q') \quad (8.5)$$

дорівнює сумі перерізів розсіяння на частинках атмосфери, помножених на відповідні кількості частинок в одиниці об'єму. Вона визначає збільшення коефіцієнта поглинання внаслідок розсіяння фотонів і має розмірність оберненої довжини.

Тут потрібно зупинитись на термінології. Як бачимо з рівняння (8.3), маємо два канали зменшення кількості енергії мірою того, як випромінювання проходить крізь речовину. Перший — це істинне поглинання, за яке відповідає коефіцієнт $\kappa(q)$ і який ще називають у зв'язку з цим істинним коефіцієнтом поглинання. Другий — це вилучення енергії з пучка випромінювання шляхом

розсіяння, за що відповідає величина $\sigma(q)$, яку називають коефіцієнтом розсіяння. Повний коефіцієнт поглинання, або, може ліпше, коефіцієнт послаблення, дорівнює, як видно з (8.3), сумі $\varkappa(q)$ та $\sigma(q)$, і він визначає сумарну швидкість виведення речовиною енергії з пучка випромінювання вздовж променя зору. Іноді його називають також коефіцієнтом екстинкції (від англійського слова extinction — згасання, послаблення). Традиційно цю назву вживають щодо земної атмосфери. Якщо розсіяння не відіграє ніякої ролі порівняно з поглинанням, то коефіцієнт екстинкції називають коефіцієнтом поглинання. У протилежному випадку говорять про коефіцієнт екстинкції, зумовленої розсіянням.

Якщо під час розсіяння фотонів атоми не змінюють свого стану, тобто $A = A'$, $\omega_{A'A} = 0$, то це когерентне розсіяння:

$$R(q, q') = \delta(\omega - \omega')\sigma(q, q'), \quad (8.6)$$

$$\sigma(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1}{V} \sum_{\text{(за частинками)} A} \sum \rho_A \Phi_{AA}(q, q'). \quad (8.7)$$

У загальному випадку функція перерозподілу за частотами не має дельтаподібного характеру — розсіяння є некогерентним унаслідок природної ширини спектральних ліній, теплового руху частинок та міжатомної взаємодії.

Для когерентного розсіяння з (8.3), (8.6) знаходимо:

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI_q}{dz} &= -\left[\varkappa(q) + \sigma(q)\right] I_q + \varkappa(q) B_{\omega, \alpha}(T) \\ &+ \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \sigma(q, q') I_{q'}, \end{aligned} \quad (8.8)$$

причому тут $q' = (\mathbf{k}', \alpha)$, $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = \omega/c$. При практичних розрахунках величину $\sigma(q, q')$ замінюють деяким середнім значенням

$$\overline{\sigma(q, q')} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha'=1,2} \frac{1}{4\pi} \int d\Omega' \sigma(q, q') = \frac{\sigma(q)}{8\pi}. \quad (8.9)$$

У цьому разі отримуємо рівняння переносу

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI_q}{dz} &= - \left[\varkappa(q) + \sigma(q) \right] I_q + \varkappa(q) B_{\omega, \alpha}(T) \\ &+ \sigma(q) \frac{1}{8\pi} \sum_{\alpha'=1,2} \int d\Omega' I_{q'}, \end{aligned} \quad (8.10)$$

яке є загальноприйнятим рівнянням феноменологічної теорії [3, 4, 6, 7]. На цьому рівнянні базуються фактично всі дослідження зоряних спектрів¹⁴.

Рівняння (8.10) записане для світла із заданою поляризацією α . Якщо нас не цікавить поляризація, то в (8.10) необхідно підсумувати обидві частини рівняння за поляризаціями. Нехтуючи залежністю $\varkappa(q)$, $\sigma(q)$ від поляризації, запишемо рівняння переносу для інтенсивності випромінювання, вимірюваного за шкалою довжин хвиль:

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI(\lambda, \Omega)}{dz} &= - \left[\varkappa_\lambda(\Omega) + \sigma_\lambda(\Omega) \right] I(\lambda, \Omega) \\ &+ \varkappa_\lambda(\Omega) B_\lambda(T) + \sigma_\lambda(\Omega) \frac{1}{4\pi} \int I(\lambda, \Omega') d\Omega', \end{aligned} \quad (8.11)$$

$$I(\lambda, \Omega) = \sum_{\alpha=1,2} I(\lambda, \alpha, \Omega), \quad (8.12)$$

$$B_\lambda(T) = \sum_{\alpha=1,2} B_{\lambda, \alpha}(T) = \frac{4\pi c^2 \hbar}{\lambda^5} \frac{1}{e^{2\pi c \hbar / \lambda T} - 1} \quad (8.13)$$

¹⁴Уперше його вивів феноменологічним шляхом німецький астрофізик Карл Шварцшільд ще в 1905 році в праці “Про рівновагу сонячної атмосфери”. Карл Шварцшільд (1873-1916) — один із засновників теоретичної астрофізики. Склавав каталог фотографічних величин понад 3500 зір (“Геттингенська актинометрія”, 1910–1912). Створив теорію променевої рівноваги й застосував її до зоряних атмосфер. Уперше отримав точний розв’язок рівнянь теорії відносності Айнштейна (метрика Шварцшільда для сферично-симетричного розподілу мас). Між іншим, питаннями теорії випромінювання займався й видатний німецький математик Давид Гільберт (1862–1943).

— функція Планка для неполяризованого випромінювання. Величини $\varkappa_\lambda(\Omega)$, $\sigma_\lambda(\Omega)$ є середніми значеннями величин $\varkappa(q)$ та $\sigma(q)$:

$$\varkappa_\lambda(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} \varkappa(q),$$

(8.14)

$$\sigma_\lambda(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} \sigma(q),$$

причому $q = (\mathbf{k}, \alpha)$, $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$.

Повернімось знову до точного рівняння (8.1). Висловлені раніше міркування при його лінеаризації розгорнемо тепер докладніше і насамперед запишемо (8.1) з урахуванням нелінійних членів, приймаючи гіпотезу про локальну термодинамічну рівновагу в зоряній атмосфері:

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{dI_q}{dz} &= -[\varkappa(q) + \sigma(q)]I_q + \varkappa(q)B_{\omega,\alpha}(T) \\ &+ \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^\infty d\omega' \left(\frac{\omega}{\omega'}\right)^3 e^{-\hbar(\omega-\omega')/T} R(q, q')I_{q'} \\ &- I_q \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^\infty d\omega' \left(1 - e^{-\hbar(\omega-\omega')/T}\right) \\ &\times R(q, q') \left(\frac{2\pi}{\omega'}\right)^3 \frac{c^2}{\hbar} I_{q'}. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Останній член у правій частині цього рівняння описує нелінійні ефекти. Легко пересвідчитись, беручи до уваги (8.6), що цей нелінійний доданок для когерентного розсіяння перетворюється в нуль. Отже, нелінійні ефекти “вмикаються” разом із некогерентним розсіянням.

Звернімо також увагу на те, що цей нелінійний доданок у рівнянні (8.15), який ми позначимо разом зі знаком через $\Delta(q)$, у класичній межі ($\hbar \rightarrow 0$) набуває вигляду:

$$\Delta \underset{\hbar \rightarrow 0}{=} -I_q \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^{\infty} d\omega' R(q, q') \left(\frac{2\pi}{\omega'} \right)^3 \frac{c^2(\omega - \omega')}{T} I_{q'}. \quad (8.16)$$

Залишається сказати ще декілька слів про можливість інтегрування рівняння (8.15). Наголосимо вдруге, що це рівняння є точним рівнянням переносу випромінювання, яке враховує і двофотонні переходи. Наскільки нам відомо, дослідження внеску нелінійних ефектів у теорії зоряних спектрів не проводилось. Було б цікаво вивчити вплив нелінійного механізму на формування тонкої структури зоряних спектрів. А надто, що особливих зусиль для цього не потрібно, оскільки в точне рівняння входить та ж величина $R(q, q')$, що й у злінеаризоване (8.3), а можливості сучасних комп'ютерів усувають будь-які перешкоди при його інтегруванні.

Перш ніж приступати до знаходження та аналізу розв'язку рівняння переносу випромінювання, необхідно обчислити явно вирази для коефіцієнта поглинання, перерізу розсіяння, функції перерозподілу за частотами з урахуванням конкретних фізичних умов в атмосферах зір.

РОЗДІЛ II

ПРИРОДНА ШИРИНА СПЕКТРАЛЬНИХ ЛІНІЙ

§ 9. Класична теорія природної ширини спектральної лінії

Виводячи рівняння переносу, ми припускали, що атомні стани $|A\rangle$ є стаціонарними. Іншими словами, уважалось, що електрон, рухаючись в атомі в деякому зв'язаному стані, може залишатися в цьому стані безмежно довго. Насправді стаціонарним станом є лише основний стан атомної системи. Усі збуджені стани квазістаціонарні — через деякий час атом спонтанно переходить із збуджених станів у стани з нижчою енергією i , в решті-решт, в основний стан, якому відповідає найменше значення енергії. Час перебування атомів у збудженому стані називають часом життя цього квазістаціонарного стану. Причиною спонтанних переходів є взаємодія атомної системи з нульовими коливаннями електромагнітного поля. Мовою класичної електродинаміки, причиною спонтанних переходів є взаємодія заряду з полем, яке він сам випромінює, — так звана реакція випромінювання.

Квазістаціонарність збуджених станів приводить до того, що спектральні лінії ізольованої атомної системи є не безмежно вузькими, а мають деяку ширину, яку називають природною шириною спектральної лінії. Міжатомна взаємодія й теплові рухи атомів спричинюють подальше розширення спектральних ліній. Останні ефекти, як уже вказувалось, узято до уваги в загальних формулах для коефіцієнта поглинання й перерізу розсіяння. Урахування цих явищ вимагає окремого дослідження знайдених виразів для конкретних фізичних моделей атмосфери зорі, яке ми проведемо в наступних розділах. Щодо природної ширини

спектральних ліній, то вона в знайдених вище виразах не врахована саме у зв'язку з припущенням, що всі атомні стани є стаціонарними. Хоч остаточні вирази, які отримують після врахування реакції випромінювання, не складні, сама теорія природної ширини ліній є тонким і аж ніяк не простим питанням [10]. Тому тут ми розглянемо ближче цю задачу і вкажемо основні моменти її розв'язку.

Почнемо з класичного розгляду. На рухомий заряд, що випромінює, діє сила Лоренца, створена електромагнітним полем самого заряду. Вираз для неї можна знайти прямим обчисленням, використовуючи запізнювальні потенціали Лієнара–Віхерта для електромагнітного поля точкового заряду e . Отриманий вираз для сили, яка діє на заряд, можна розкласти в ряд за степенями $1/c$ [10]:

$$\mathbf{f} = -\frac{4\varepsilon_0}{3c^2}\dot{\mathbf{v}} + \frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\mathbf{v}} + O(1/c^4), \quad (9.1)$$

де ε_0 — власна електростатична енергія заряду, \mathbf{v} — його швидкість; крапками над літерами позначені похідні за часом. Слід відзначити, що цей розклад є асимптотичним.

Запишемо рівняння руху Ньютона для заряду маси m_0 , урахуовуючи силу реакції випромінювання (9.1) і зовнішню силу \mathbf{f}_{ext} :

$$\left(m_0 + \frac{4\varepsilon_0}{3c^2}\right)\dot{\mathbf{v}} = \frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\mathbf{v}} + \mathbf{f}_{\text{ext}}. \quad (9.2)$$

Множник біля прискорення

$$m = m_0 + \frac{4\varepsilon_0}{3c^2} \quad (9.3)$$

має зміст спостережуваної маси заряду. Внутрішня неузгодженість класичної електродинаміки проявляється в тому, що електромагнітна частина маси $4\varepsilon_0/3c^2$ для точкового заряду є величиною безмежною $\varepsilon_0 \sim e^2/a_0$, де його “радіус” $a_0 \rightarrow 0$. Уважається, що ця безмежність компенсується іншою безмежністю, яка формується силами неелектромагнітного походження в m_0 ,

і в результаті ми спостерігаємо скінченну величину (9.3). Сили неелектромагнітного походження потрібні хоч би для того, щоб забезпечити стабільність розподілу заряду в такій частинці, як електрон. У квантовій теорії ці розбіжності залишаються, але є слабшими, логарифмічними, а не степеневими. Ця проблема внутрішньої структури електрона не розв'язана до сьогодні.

Другий доданок у правій частині (9.1) приводить до гальмування руху випромінюючого заряду. Важливо, що цей доданок у виразі для сили самодії не залежить від розподілу заряду, він зумовлений ефектом запізнення всередині частинки. Так, наприклад, для квазіпружної зовнішньої сили $\mathbf{f}_{\text{ext}} = -m\omega_0^2\mathbf{r}$ наближений розв'язок рівняння руху дає згасаючі коливання¹

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 e^{-\gamma t/2} \cos(\omega_0 + \Delta\omega_0)t, \quad (9.4)$$

де зсув частоти й постійна загасання дорівнюють:

$$\Delta\omega_0 = -5\gamma^2/8\omega_0, \quad (9.5)$$

$$\gamma = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{mc^3}. \quad (9.6)$$

Уважаємо, що осцилятор запущено в рух у момент часу $t = 0$ з максимальним зміщенням \mathbf{r}_0 . Наближення полягає у припущенні, що сила реакції є малою порівняно із зовнішніми силами, і це справді так для не дуже високих частот:

$$\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{\mathbf{v}}| \ll m\omega_0^2 |\mathbf{r}|,$$

¹Між іншим, якщо зовнішні сили відсутні, то рівняння (9.2), крім звичайного розв'язку $\mathbf{v} = \text{const}$, дає також розв'язок $\dot{\mathbf{v}} = \dot{\mathbf{v}}_0 e^{\gamma t}$. Отже, прискорення наростає із часом, коли його початкове значення $\dot{\mathbf{v}}_0 \neq 0$, тобто частинка, самоприскорюється, що є безглуздя. Це ще одна з нерозв'язаних проблем електродинаміки, хоча скоріше вона пов'язана з тим, що в розкладі (9.1), який, мабуть, є асимптотичним рядом, ми обмежились лише першими двома членами. Наступні члени розкладу залежать і від внутрішньої структури частинки.

або

$$\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_0^3 \ll m \omega_0^2,$$

а для довжини хвилі $\lambda = 2\pi c/\omega_0$ отримаємо, що $\lambda \gg 4\pi e^2/3mc^2 \sim 10^{-12}$ см = 10^{-4} Å, коли m є масою електрона. Насправді ця нерівність виконується з великим запасом.

Отже, сила реакції приводить до загасання коливань осцилятора і до зсуву його частоти. У результаті інтенсивність випромінювання або поглинання таким осцилятором енергії, яка пропорційна до квадрата прискорення $\dot{\mathbf{v}}$, не буде мати в околі частоти ω_0 дельтаподібного характеру, а буде функцією частоти з гострим максимумом у точці $\omega_0 + \Delta\omega_0$ з лоренцівським контуром. Покажемо це.

З курсу електродинаміки добре відомо [11, 12], що спектральний розклад інтенсивності дипольного випромінювання

$$I(\omega) = \frac{2e^2}{3\pi c^3} |\ddot{\mathbf{r}}_\omega|^2, \quad (9.7)$$

де коефіцієнт Фур'є² другої похідної за часом від радіус-вектора осцилятора

$$\ddot{\mathbf{r}}_\omega = \int_0^\infty e^{i\omega t} \ddot{\mathbf{r}} dt,$$

причому повна енергія випромінювання

$$E = \int_0^\infty I(\omega) d\omega. \quad (9.8)$$

²Жан Батіст Жозе Фур'є (1768–1830) — французький математик і фізик; створив метод зображення функцій у вигляді тригонометричних рядів (ряди Фур'є), вивів рівняння теплопровідності, створив термоелектричну батарею. Закінчив військову школу, як офіцер брав участь у єгипетському поході Наполеона, з 1802 року був префектом департаменту в Греноблі, від 1817 року вів академічне життя в Парижі.

У нашому випадку, беручи до уваги (9.4),

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{r}_0 e^{-\gamma t/2} \left\{ \left[\left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 - (\omega_0 + \Delta\omega_0)^2 \right] \cos(\omega_0 + \Delta\omega_0)t + \gamma(\omega_0 + \Delta\omega_0) \sin(\omega_0 + \Delta\omega_0)t \right\}.$$

Оскільки виконуються нерівності $\gamma/\omega_0 \ll 1$ і $\Delta\omega_0/\omega_0 \ll 1$, то запишемо лише головний доданок для другої похідної:

$$\ddot{\mathbf{r}} = -\omega_0^2 \mathbf{r}_0 e^{-\gamma t/2} \cos(\omega_0 + \Delta\omega_0)t. \quad (9.9)$$

Тепер

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{r}}_\omega &= -\omega_0^2 \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \mathbf{r}_0 e^{-\gamma t/2} \cos(\omega_0 + \Delta\omega_0)t \quad (9.10) \\ &= -\frac{\mathbf{r}_0 \omega_0^2}{2} \int_0^\infty e^{i\omega t - \gamma t/2} \left[e^{i(\omega_0 + \Delta\omega_0)t} + e^{-i(\omega_0 + \Delta\omega_0)t} \right] dt \\ &= -\mathbf{r}_0 \frac{\omega_0^2 (i\omega - \gamma/2)}{(\omega - \omega_0 - \Delta\omega_0)(\omega + \omega_0 + \Delta\omega_0) + i\omega\gamma - (\gamma/2)^2}. \end{aligned}$$

Унаслідок мализни величини γ , а саме $\gamma/\omega_0 \ll 1$, функція $\ddot{\mathbf{r}}_\omega$ має різкий максимум у точці $\omega = \omega_0 + \Delta\omega_0$, тому, залишаючи лише головні внески, отримуємо³

$$\ddot{\mathbf{r}}_\omega = \frac{\mathbf{r}_0 \omega_0^2}{2i} \frac{1}{(\omega - \omega_0 + \Delta\omega_0) + i\gamma/2}. \quad (9.11)$$

³Важливо, що ми працюємо з коефіцієнтом Фур'є для другої похідної радіуса-вектора \mathbf{r} , а не для самого \mathbf{r} . Якщо зробити фур'є-перетворення для $\mathbf{r}(t)$, а потім взяти другу похідну, то ми отримуємо в (9.11) множник ω^2 , а не ω_0^2 . У результаті виникають проблеми при розрахунку повної енергії E , оскільки одержуємо розбіжний інтеграл. Отже, маємо приклад того, коли операція похідної за часом і перетворення Фур'є не комутують.

Тепер інтенсивність

$$I(\omega) = \frac{2e^2\omega_0^4 r_0^2}{12\pi c^3} \frac{1}{(\omega - \omega_0 - \Delta\omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (9.12)$$

Скористайтесь виразом (9.6) для величини γ і остаточно будемо мати:

$$I(\omega) = I_0 \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0 + \Delta\omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}, \quad (9.13)$$

де

$$I_0 = \frac{m\omega_0^2 r_0^2}{2} \quad (9.14)$$

— початкова енергія осцилятора. Повна енергія (9.8)

$$\begin{aligned} E &= I_0 \int_0^\infty \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0 + \Delta\omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} d\omega \\ &= I_0 \frac{1}{\pi} \int_{-x_0}^\infty \frac{dx}{x^2 + 1} \underset{\gamma/\omega_0 \rightarrow 0}{=} I_0, \end{aligned} \quad (9.15)$$

де $x_0 = 2(\omega_0 - \Delta\omega_0)/\gamma$. За умови $\omega_0/\gamma \gg 1$ нижню межу тягнемо на $(-\infty)$ й інтеграл дорівнює π . Отже, енергія, яка висвічується в усьому діапазоні частот, дорівнює, як і повинно бути згідно з законом збереження, початковій енергії осцилятора.

Підведемо підсумок: по-перше, зворотна дія випромінювання заряду на його ж рух зводиться до розширення спектральної лінії, а по-друге — до зсуву частоти випромінювання. Контур лінії випромінювання, внаслідок радіаційного загасання, має лоренцівський характер (9.13) із максимумом інтенсивності, що дорівнює $2I_0/\pi\gamma$ при частоті $\omega = \omega_0 + \Delta\omega_0$. Якщо частоту ω зсунути на величину $\gamma/2$, то інтенсивність зменшиться удвічі, тому γ називають шириною лінії. Цю ширину спектральної лінії, яка зумовлена силою гальмування випромінювання, тобто самодією електрона, називають природною шириною. При прямуванні $\gamma \rightarrow 0$

функція $I(\omega)$ вироджується в дельта-функцію $I_0\delta(\omega - \omega_0)$. Таким чином, при обчисленні, наприклад, внеску зв'язано-зв'язаних переходів у коефіцієнт поглинання врахування ефекту радіаційного загасання зводиться, як ми побачимо далі, до заміни в (6.3), (6.6) дельта-функції лоренцівським контуром (9.13).

§ 10. Теорія квазістаціонарних станів квантових систем

З погляду квантової теорії, спонтанне випромінювання ізольованого атома можна розглядати як квантовий перехід із збудженого стану $|A\rangle$ на всі стани $|C\rangle$ з меншою енергією. У результаті ймовірність перебування атома у збудженому стані буде із часом t зменшуватись і прямуватиме до нуля при $t \rightarrow \infty$. Це відповідає експоненційному зменшенню амплітуди коливань гармонічного осцилятора в класичній теорії, яку ми розглянули в попередньому параграфі. Отже, стани квантовомеханічної системи $|A\rangle$ вже не є стаціонарними, у яких залежність від часу визначає гармонічний множник $\exp(-iE_A t/\hbar)$, а квазістаціонарними. Назва “квазістаціонарні” відбиває слабке (як побачимо далі) загасання відповідної амплітуди ймовірності $|A\rangle$ перебування атома в цьому стані. За винятком основного стану, з якого закон збереження енергії забороняє висвічування фотона (за означенням, основний стан має найнижче значення енергії), усі збуджені стани є квазістаціонарними. Такий характер часової залежності амплітуди ймовірності $|A\rangle$ також приводить до розширення профілю спектральної лінії і до зсуву частоти випромінювання в максимумі його інтенсивності.

Після цих якісних попередніх зауважень перейдімо до кількісного аналізу. Беручи до уваги виняткову важливість цього, як уже згадувалось, зовсім непростого питання, а також те, що ці розрахунки ми будемо застосовувати надалі до обчислення розширення спектральної лінії внаслідок міжчастинкових взаємодій, повчально й корисно для глибшого розуміння почати розгляд із простого випадку дворівневої системи. Крім того, ми не хотіли

б, щоб у Читача склалося враження, що деяких результатів та їх узагальнень досягаємо на рівні заклинань, тому, як і в класичній теорії, зробимо докладний аналіз.

Отже, нехай ми маємо квантовомеханічну систему з гамільтоніаном \hat{H}_0 , яка може перебувати у двох станах $|i\rangle$ та $|f\rangle$ з енергіями E_i та E_f відповідно і на яку накладаємо збурення \hat{V} . Під дією цього збурення система може переходити з одного стану в інший. Прикладом такої системи може бути атомний електрон у збудженому стані за відсутності фотонів — це початковий (initial) стан $|i\rangle$. Під дією збурення, тобто під дією взаємодії електрона з нульовими коливаннями (флюктуаціями напруженостей) електромагнітного поля, електрон переходить в основний стан і при цьому виникає один фотон — це кінцевий (final) стан $|f\rangle$. Запишемо рівняння Шрединґера для збудженої системи:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (10.1)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (10.2)$$

причому за умовою

$$\hat{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle, \quad \hat{H}_0|f\rangle = E_f|f\rangle.$$

Шукаємо розв'язок у вигляді лінійної комбінації хвильових функцій незбудженої системи⁴

$$\psi_i = e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}|i\rangle, \quad \psi_f = e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}|f\rangle, \quad (10.3)$$

$$\psi = C_i e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}|i\rangle + C_f e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}|f\rangle. \quad (10.4)$$

Коефіцієнти C_i , C_f цього розкладу залежать від часу і мають зміст амплітуд імовірностей перебування системи відповідно у

⁴Сподіваємось, Читача не зіб'є з пантелику те, що ми позначаємо початковий стан $|i\rangle$ і уявну одиницю $i = \sqrt{-1}$ однією літерою; інколи розплутування позначень сприяє кращому розумінню.

станах $|i\rangle$ та $|f\rangle$. Підставмо хвильову функцію (10.4) у вихідне рівняння Шрединґера (10.1) і після елементарних обчислень похідних за часом отримане рівняння помножмо⁵ зліва спочатку на $|i\rangle^* = \langle i|$, а потім на $|f\rangle^* = \langle f|$, скористайтесь далі умовою ортонормованості незбурених хвильових функцій $\langle i|i\rangle = 1$, $\langle f|f\rangle = 1$, $\langle i|f\rangle = \langle f|i\rangle = 0$ і знайдемо таку систему двох рівнянь для невідомих коефіцієнтів C_i та C_f :

$$\begin{cases} i\hbar\dot{C}_i = C_i V_{ii} + e^{i\omega_{if}t} V_{if} C_f, \\ i\hbar\dot{C}_f = e^{i\omega_{if}t} V_{fi} C_i + C_f V_{ff}. \end{cases} \quad (10.5)$$

Тут крапками позначені похідні за часом. Матричні елементи оператора збурення

$$V_{mn} = \langle m|\hat{V}|n\rangle, \quad m, n = i, f,$$

а частоти переходів

$$\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar}, \quad \omega_{fi} = -\omega_{if}.$$

Знайдені формули є загальними і добре відомими виразами у квантовомеханічній теорії збурень, залежних від часу, які експлуатують у різних задачах для систем із двома станами.

Нехай у початковий момент часу наша квантовомеханічна система перебуває в незбуреному стані $|i\rangle$, тобто при $t = 0$ коефіцієнт $C_i = 1$, а $C_f = 0$. Наше завдання полягає у відшуванні розв'язку системи двох рівнянь (10.5). Робимо підстановку

$$C_i = e^{-iV_{ii}t/\hbar} C'_i, \quad C_f = e^{-iV_{ff}t/\hbar} C'_f \quad (10.6)$$

і зводимо наші рівняння до таких:

$$\begin{cases} i\hbar\dot{C}'_i = C'_f V_{if} e^{i\omega'_{if}t}, \\ i\hbar\dot{C}'_f = C'_i V_{fi} e^{i\omega'_{fi}t}, \end{cases} \quad (10.7)$$

⁵Це множення означає й одночасне інтегрування за координатами, від яких залежать хвильові функції і які ми явно не виписували з міркувань простоти запису.

де штриховані частоти

$$\omega'_{fi} = \frac{(E_f + V_{ff} - E_i - V_{ii})}{\hbar} = \omega_{fi} + \frac{V_{ff} - V_{ii}}{\hbar}, \quad (10.8)$$

$$\omega'_{if} = -\omega'_{fi}.$$

Інтуїтивно ми розуміємо, що в міру того як на квантовомеханічну систему діє збурення \hat{V} , вона поступово переходить зі стану $|i\rangle$ у стан $|f\rangle$. Отже, для коефіцієнта C'_i , що визначає вагу початкової амплітуди $|i\rangle$ у стані ψ , напрошується розв'язок у вигляді, який відбиває наші сподівання і задовольняє початкову умову:

$$C'_i = e^{-\Gamma t/2}, \quad (10.9)$$

де невідома величина Γ не залежить від часу. Маючи цей розв'язок, тепер можемо проінтегрувати друге рівняння із системи (10.7):

$$\begin{aligned} C'_f &= \frac{V_{fi}}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega'_{fi}t'} C'_i dt' \\ &= \frac{V_{fi}}{i\hbar} \frac{e^{i\omega'_{fi}t - \Gamma t/2} - 1}{i\omega'_{fi} - \Gamma/2}. \end{aligned} \quad (10.10)$$

Далі, використовуючи ці явні вирази для C'_i та C'_f , з першого рівняння системи (10.7) елементарними перетвореннями знаходимо рівняння для невідомого декременту загасання Γ :

$$\frac{\Gamma}{2} = \frac{|V_{if}|^2}{\hbar^2} \frac{1 - e^{-i\omega'_{fi}t + \Gamma t/2}}{i\omega'_{fi} - \Gamma/2}. \quad (10.11)$$

Якщо запропонований розв'язок (10.9) для C'_i правильний, то Γ не повинно залежати від часу t . Ми очікуємо також (маючи досвід із класичної теорії), що декремент загасання Γ початкового стану $|i\rangle$ є малою величиною. Далі побачимо, що це припущення

справджується, і отже, у правій частині рівняння (10.11) величину Γ можна опустити (нульова ітерація). Узагалі, нас не цікавлять малі проміжки часу порядку $1/|\omega'_{fi}|$, класичною мовою — це проміжки, сумірні з періодом руху електрона навколо ядра в атомі. Отже, важливими є проміжки часу, що задовольняють умову $\omega'_{fi}t \gg 1$, тобто формально $t \rightarrow \infty$. Водночас повинна використовуватись умова $\Gamma t \ll 1$, це просто означає, що Γ є малим.

Узявши це все до уваги, отримаємо

$$\frac{\Gamma}{2} = \frac{|V_{if}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{1 - \cos \omega'_{fi}t}{i\omega'_{fi}} + \frac{\sin \omega'_{fi}t}{\omega'_{fi}} \right). \quad (10.12)$$

Розгляньмо внесок кожного доданка в круглих дужках окремо. Оскільки косинус є швидкозмінною функцією при $t \rightarrow \infty$, то внесок від цього доданка при $\omega'_{fi} \neq 0$ буде зникаюче малим, коли врахувати, що в реальній ситуації відбувається підсумовування (насправді, інтегрування) за квантовими числами f кінцевих станів⁶. Якщо $\omega'_{fi} = 0$, то весь перший доданок просто дорівнює нулеві. Отже, від першого доданка в круглих дужках залишається лише член з одиницею в чисельнику, причому за умови, що $\omega'_{fi} \neq 0$. Другий доданок при $t \rightarrow \infty$ є одним із зображень

⁶Для ілюстрації цього “нульового внеску” наведемо прості приклади інтегралів від швидкоосцилюючого косинуса $\cos xt$ при $t \rightarrow \infty$, помноженого на будь-яку “хорошу” функцію, яка забезпечує збіжність інтеграла:

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} \cos xt \, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-t^2/4},$$

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos xt}{x^2 + 1} dx = \frac{\pi}{2} e^{-|t|},$$

обидва інтеграли прямують до нуля, коли $t \rightarrow \infty$. Причиною, очевидно, є те, що $\cos xt$ при $t \rightarrow \infty$ часто змінює знак із невеликою зміною x , а “хороша” функція за такої зміни x не встигає змінити свого значення, і отже, додаються величини, рівні за модулем, але з протилежними знаками, взаємно компенсуючи себе. Між іншим, так є і в суспільному житті. Людина, яка часто змінює свою думку, не робить внеску у творення будь-чого чи то в побуті, чи то в політичному житті, незважаючи на “хороше” оточення.

δ -функції Дірака:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin \omega'_{fi} t}{\pi \omega'_{fi}} = \delta(\omega'_{fi}). \quad (10.13)$$

Тепер маємо

$$\frac{\Gamma}{2} = \frac{i}{\hbar} \Delta_2 E + \frac{\gamma}{2}, \quad (10.14)$$

де

$$\Delta_2 E = -\frac{|V_{if}|^2}{\hbar \omega'_{fi}} = \frac{|V_{if}|^2}{E_i + \Delta_1 E_i - E_f - \Delta_1 E_f}, \quad i \neq f,$$

$$\gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{if}|^2 \delta(E_f + \Delta_1 E_f - E_i - \Delta_1 E_i).$$

$$\Delta_1 E_i = V_{ii}, \quad \Delta_1 E_f = V_{ff}.$$

Величини $\Delta_1 E_i$ та $\Delta_1 E_f$ як діагональні матричні елементи оператора збурення, згідно з теорією збурень, дорівнюють першим поправкам до енергії відповідних станів, а $\Delta_2 E$ — це друга поправка до енергії початкового стану $|i\rangle$. Величина γ є декрементом згасання цього початкового стану.

Якщо би ми розглядали не дворівневий випадок, а систему з багатьма станами, то в цих формулах (і це легко показати, повторивши всі викладки спочатку) необхідно провести підсумовування за квантовими числами кінцевих станів f [8]:

$$\frac{\Gamma_i}{2} = \frac{i}{\hbar} \Delta_2 E_i + \frac{\gamma_i}{2}, \quad (10.15)$$

$$\Delta_2 E_i = \sum_{\substack{f \\ (f \neq i)}} \frac{|V_{if}|^2}{E_i + \Delta_1 E_i - (E_f + \Delta_1 E_f)}, \quad (10.16)$$

$$\gamma_i = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |V_{if}|^2 \delta(E_f + \Delta_1 E_f - E_i - \Delta_1 E_i). \quad (10.17)$$

Тут ми приписуємо величинам Γ , $\Delta_2 E$ та γ індекс початкового стану, який ми раніше опускали з міркувань простоти записів.

Права частина рівняння (10.17) — це швидкість квантових переходів системи зі стану $|i\rangle$ на всі стани $|f\rangle$. Іншими словами, стала загасання γ_i дорівнює ймовірності переходу квантовомеханічної системи за одиницю часу з початкового стану $|i\rangle$ у всі можливі кінцеві стани f . Величина

$$\tau_i = \frac{1}{\gamma_i} \quad (10.18)$$

має зміст часу життя атома у збудженому стані $|i\rangle$: чим більша ймовірність переходу із цього стану на інші, тим коротший його час життя.

Повертаючись тепер до наших коефіцієнтів C_i , C_f (10.6), випишемо їх явний вигляд, використовуючи (10.9), (10.10) та (10.15):

$$C_i = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta E_i t - \gamma_i t/2}, \quad (10.19)$$

$$C_f = V_{fi} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_1 E_f t} - e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i - \Delta E_i)t - \gamma_i t/2}}{(E_f + \Delta_1 E_f - E_i - \Delta E_i) + i\hbar\gamma_i/2}, \quad (10.20)$$

де поправка до енергії початкового стану входить тут з точністю до другого наближення:

$$\Delta E_i = \Delta_1 E_i + \Delta_2 E_i.$$

При $t \rightarrow \infty$ коефіцієнт

$$C_i = 0,$$

а

$$C_f = V_{fi} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_1 E_f t}}{(E_f + \Delta_1 E_f - E_i - \Delta E_i) + i\hbar\gamma_i/2}, \quad (10.21)$$

за умов, що $V_{fi} \neq 0$. Якщо $V_{fi} = 0$, то квантових переходів, зрозуміло, немає: $C_i = 1$, $C_f = 0$.

На завершення цього параграфу залишається сказати ще декілька слів. Може виникнути запитання стосовно знайдених розв'язків: як так сталося, що зворотне в часі рівняння Шрединґера дає незворотні в часі релаксаційні розв'язки? Один погляд на запропонований розв'язок (10.9) для C'_i та його обґрунтування вказує на те, що ми “руками занесли” незворотність у теорію, змушуючи рівняння Шрединґера лише “зв'язати” між собою фізичні величини, які входять у накинтий розв'язок. Насправді закрита система дає осцилюючі розв'язки, але ми відібрали лише ті, що описують її рух від початкового стану $|i\rangle$ до кінцевого $|f\rangle$, штучно перекриваючи шлях для зворотного руху, тобто для переходів “уверх”. Ми повернемося до цього питання в наступних параграфах, розраховуючи для конкретних явищ механізми й деталі організації цієї незворотності.

§ 11. Квантова теорія природної ширини спектральної лінії

Загальні вирази, які ми щойно знайшли, застосуємо для системи “атом плюс електромагнітне поле”. Нехай у початковий момент часу $t = 0$ атом перебуває в деякому збудженому стані $|A\rangle$ з енергією E_A , а хвильова функція поля дорівнює $|\dots, N_q, \dots\rangle$. Отже, амплітуда початкового стану системи $|i\rangle = |A; \dots, N_q, \dots\rangle = |A\rangle |\dots, N_q, \dots\rangle$. У кінцевому стані маємо хвильову функцію $|f\rangle = |C; \dots, N_q + 1, \dots\rangle = |C\rangle |\dots, N_q + 1, \dots\rangle$, яка описує атом у стані $|C\rangle$ з енергією $E_C < E_A$ і поле з одним додатковим фотоном з хвильовим вектором \mathbf{k} й поляризацією α . Оператор збурення дається виразом (3.1), у якому беремо до уваги лише перший доданок. Після того, як фотон вилітає з атома в навколишній простір, він мандрує Всесвітом, і ймовірність його зустрічі зі “своїм” атомом є надзвичайно малою. Реліктове електромагнітне випромінювання, яке відкрили в 1965 році американські радіоастрономи А. Пензіас і Р. Вільсон, — чудовий приклад існування таких блукаючих фотонів. Через деякий час така подія відбудеться й атом перейде знову у збуджений стан, здійснюючи перехід “уверх”. Але проміжок часу, через який станеться

ця зустріч, на багато порядків перевищує його атомні масштаби. Саме ця обставина є виправданням того, що при виведенні основних формул теорії квазістаціонарних станів ми не врахували квантових переходів “уверх”, уносячи тим самим незворотність подій у часі.

Наша мета — розрахувати сталу загасання γ_A . Обчислення, які необхідно виконати для цього, аналогічні до тих, що ми робили в § 5 при виведенні інтеграла зіткнень для однофотонних переходів, і фактично нам залишилось лише перенести їх на наш випадок. Передусім зауважуємо, що діагональні елементи $V_{ii} = V_{ff} = 0$, а підсумовування за квантовими числами f в рівняннях (10.16), (10.17) є підсумовуванням за $q = (\mathbf{k}, \alpha)$, тобто за хвильовим вектором фотона \mathbf{k} , його поляризацією та за атомними квантовими числами C . Не буде зайвим ще раз нагадати, що γ_A дорівнює ймовірності переходу $|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |C; \dots, N_q + 1, \dots\rangle$ з народженням одного фотона в деякому стані q і підсумованої за всіма квантовими числами C “нижчих” станів $|C\rangle$, а також за всіма можливими квантовими числами фотона q :

$$\gamma_A = \sum_q \sum_{\substack{C \\ (C < A)}} w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |C; \dots, N_q + 1, \dots\rangle}. \quad (11.1)$$

Вираз для ймовірності переходу, що входить в (11.1), формально збігається із знайденим виразом (5.11) при заміні в останньому $A' = C$. У результаті

$$\begin{aligned} \gamma_A &= \sum_q \sum_{\substack{C \\ (C < A)}} \left(\frac{2\pi e}{m} \right)^2 \frac{N_q + 1}{V\omega_k} \left| \langle C | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2 \\ &\times \delta(E_C - E_A + \hbar\omega_k). \end{aligned} \quad (11.2)$$

Переходимо в цьому виразі від суми за хвильовим вектором до інтегрування за частотою та кутами згідно з (8.2). При наявності дельта-функції таке інтегрування виконується елементарно і

залишається лише інтегрування за кутами:

$$\gamma_A = \sum_{\substack{C \\ (C < A)}} \frac{e^2 \omega_{AC}^2}{mc^3} \sum_{\alpha} (N_q + 1) \int f_{AC}(q) d\Omega / 4\pi, \quad (11.3)$$

$$q = (\mathbf{k}, \alpha), \quad |\mathbf{k}| = \omega_{AC}/c,$$

тут ми скористались позначенням (5.13) для $f_{AC}(q)$.

Цей вираз повністю узгоджується з класичною постійною загасання (9.6). Справді, для нерухомого атома, унаслідок експоненційного зменшення хвильових функцій електрона з відстанню від центра атома, внесок у матричний елемент у (5.13) даватимуть значення \mathbf{r} порядку розмірів атома $a \sim 1 \text{ \AA}$. Тому $\mathbf{k}\mathbf{r} \sim 2\pi a/\lambda \ll 1$ для видимої ділянки спектра, експоненту в (5.13) можна замінити одиницею (так зване наближення дипольних переходів), після чого інтегрування за кутовими змінними у (11.3) є не чим іншим, як усередненим $\cos^2 \theta$, де θ кут між векторами \mathbf{e}_q і матричним елементом оператора імпульсу $\hat{\mathbf{p}}$. Це усереднення дає множник 1/3, сума за поляризаціями — множник 2. Крім того, нас цікавлять спонтанні переходи, коли $N_q = 0$, і для простоти обмежимося дворівневим атомом. У результаті

$$\gamma_A = \frac{2e^2 \omega_0^2}{mc^3} f_{AC}, \quad (11.4)$$

$$\omega_0 = \omega_{AC},$$

величина

$$f_{AC} = \frac{2}{3m\hbar\omega_{AC}} |\mathbf{p}_{AC}|^2, \quad (11.5)$$

$$\mathbf{p}_{AC} = \int \psi_A^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_C(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (11.6)$$

має назву “сила осцилятора”⁷ [8]. Коли скористись тим, що оператор імпульсу $\hat{\mathbf{p}} = m\hat{\mathbf{r}}$, то легко показати, що сила осцилятора

$$f_{AC} = \frac{2m\omega_{AC}}{3\hbar} |\mathbf{r}_{AC}|^2, \quad (11.7)$$

$$\mathbf{r}_{AC} = \int \psi_A^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_C(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (11.8)$$

Для випадку лінійної поляризації випромінювання уздовж осі x користуємось для сили осцилятора таким виразом:

$$f_{AC} = \frac{2m\omega_{AC}}{\hbar} |x_{AC}|^2.$$

Використовуючи наближені хвильові функції для розрахунку сил осцилятора, слід пам’ятати, що вихідним є вираз (11.5), який при цьому може не збігатись з (11.7).

Якщо за модель атома взяти квантовий лінійний гармонічний осцилятор із частотою $\omega_0 = \omega_{AC}$, то матричний елемент оператора координати x_{AC} між першим збудженим станом $|A\rangle$ і основним станом $|C\rangle$ дорівнює [8]

$$x_{AC} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}. \quad (11.9)$$

Тому величина $f_{AC} = 1/3$, а стала загасання

$$\gamma_A = \frac{2e^2\omega_0^2}{3mc^3},$$

⁷ Назва “сила осцилятора” тягнеться ще з класичної теорії показника заломлення світла, яка ґрунтується на моделі речовини як сукупності осциляторів із різними власними частотами. Внесок у залежність показника заломлення від довжини хвилі осциляторів певної частоти пропорційний до їх кількості. Виявилось, однак, що для узгодження з експериментом кількість цих осциляторів повинна бути меншою, ніж одиниця. Отримані пізніше квантовомеханічні формули для показника заломлення збігаються з класичними, якщо, замість кількості осциляторів, поставити величини f_{AC} . Вони вже мають інший зміст, зокрема f_{AC} можуть бути і від’ємними числами. Але, зберігаючи усталену термінологію, їх називають силами осцилятора, підкреслюючи тим самим, що внесок у показник заломлення оптичного електрона є різним (різної сили) залежно від його квантового стану.

що точно збігається з її класичним значенням (9.6).

Звідси робимо також висновок про мализну сталої загасання. Оскільки характерні частоти ω_0 мають порядок атомних частот,

$$\hbar\omega_0 \sim \frac{me^4}{\hbar^2},$$

то

$$\frac{\gamma_A}{\omega_0} \sim \alpha^3 \simeq 10^{-7},$$

де константа тонкої структури $\alpha = e^2/\hbar c \simeq 1/137$.

Тепер потрібно розглянути частотну залежність інтенсивності випромінювання. Для цього звернімося до виразу (10.21) для коефіцієнта C_f при $t \rightarrow \infty$, який має зміст амплітуди ймовірності того, що система “атом плюс поле” знаходиться в кінцевому стані $|f\rangle$. Якщо $|C_f|^2$ помножити на енергію фотона $\hbar\omega_k$ і підсумувати за \mathbf{k} та α , то отримаємо повну енергію, яку випромінює атом. Отже,

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \hbar\omega_k |C_f|^2 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \hbar\omega_k \times \frac{|V_{fi}|^2}{(E_C - E_A - \Delta E_A + \hbar\omega_k)^2 + (\hbar\gamma_A/2)^2}, \quad (11.10)$$

де матричний елемент (див. § 5)

$$\begin{aligned} V_{fi} &= \langle C; \dots, N_q + 1, \dots | -\frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{p}}) | A; \dots, N_q, \dots \rangle \\ &= -\frac{e}{mc} \left[\frac{2\pi c^2 \hbar}{V \omega_k} (N_q + 1) \right]^{1/2} \langle C | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \end{aligned} \quad (11.11)$$

і зсув енергії

$$\Delta E_A = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \frac{|V_{fi}|^2}{E_A - E_C - \hbar\omega_k}. \quad (11.12)$$

Для спонтанних переходів ($N_q = 0$), які нас зараз цікавлять, після переходу, згідно з (8.2), від суми за \mathbf{k} до інтеграла за частотою $\omega = \omega_k$ знаходимо повну енергію

$$E = \frac{e^2}{4\pi^2 m^2 c^3} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(\omega - \omega_0 - \Delta_0)^2 + (\gamma_A/2)^2} \times \sum_\alpha \int d\Omega \left| \langle C | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2, \quad (11.13)$$

тут $k = \omega/c$, а

$$\omega_0 = \frac{E_A - E_C}{\hbar}, \quad \Delta\omega_0 = \Delta E_A / \hbar \quad (11.14)$$

або

$$E = \hbar\omega_0 \frac{e^2}{\pi m c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^2 \bar{f}_{AC}}{(\omega - \omega_0 - \Delta\omega_0)^2 + (\gamma_A/2)^2} d\omega, \quad (11.15)$$

де величина

$$\bar{f}_{AC} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} \int \frac{d\Omega}{4\pi} f_{AC}(q) \quad (11.16)$$

зводиться при $k = 0$ до сили осцилятора (11.5). Головний внесок в інтеграл (інтеграл збігається при $\omega \rightarrow \infty$ завдяки залежності f_{AC} від $k = \omega/c$) дають частоти біля ω_0 , тому

$$E = \hbar\omega_0 \int_0^\infty \frac{\gamma_A/2\pi}{(\omega - \omega_0 - \Delta\omega_0)^2 + (\gamma_A/2)^2} d\omega, \quad (11.17)$$

де ми скористались означенням (11.4) для сталої загасання γ_A . Отже, частотний розподіл інтенсивності випромінювання має лоренцівський характер:

$$I(\omega) = \hbar\omega_0 \frac{\gamma_A/2\pi}{(\omega - \omega_0 - \Delta\omega_0)^2 + (\gamma_A/2)^2}. \quad (11.18)$$

Маємо повну аналогію з класичним випадком, лише з тією різницею, що множником тут виступає не класична енергія осцилятора (9.14), а квант $\hbar\omega_0$ для повної енергії. Ураховуючи, як і раніше, мализну γ_A , отримуємо (див. (9.15)), як і повинно бути,

$$E = \int_0^{\infty} I(\omega) d\omega = \hbar\omega_0. \quad (11.19)$$

Сталу загасання γ_A називають також радіаційною шириною рівня A . Назва пов'язана з тим, що скінченний час життя $\tau_A = 1/\gamma_A$ атома у стані $|A\rangle$ через співвідношення невизначеностей між енергією і часом породжує невизначеність енергії $\sim \hbar/\tau_A = \hbar\gamma_A$. Тобто енергетичний рівень E_A розширюється (“розмивається”) на величину $\hbar\gamma_A$.

Ми не можемо зупинятись на обчисленні зсуву частоти $\Delta\omega_0$ (11.14) з виразу (11.12), оскільки це виведе нас на розрахунок радіаційних поправок у квантовій електродинаміці, що є за межами нашого завдання. Ми подавали тут лише ті відомості, які необхідні для подальшого розгляду теорії зоряних спектрів.

Зробимо зауваження, яке стосується врахування впливу випромінювання на ширину спектральних ліній. Унаслідок індукованого випромінювання час життя атомів у збуджених станах зменшується, що приводить до збільшення ширини рівнів, тобто величини γ_A . Урахування цього ефекту можна зробити, взявши до уваги, що переходи зі стану $|A; \dots, N_q, \dots\rangle$ у стан $|C; \dots, N_q + 1, \dots\rangle$ відбуваються не у вакуумі. Тобто ми повинні використати вираз (11.3), не покладаючи в ньому $N_q = 0$. У результаті для постійної загасання γ_A знаходимо вираз

$$\gamma_A = \sum_C \frac{e^2 \omega_{AC}^2}{mc^3} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega}{4\pi} f_{AC}(q) \left[1 + \left(\frac{2\pi}{\omega} \right)^3 \frac{c^2 I_q}{\hbar} \right], \quad (11.20)$$

$(C < A)$

у якому ми, згідно з (2.2), замінили числа заповнення фотонів через інтенсивність випромінювання I_q . Для рівноважного випромінювання, коли функція I_q збігається з функцією Планка

(6.7) з (11.20), отримуємо

$$\gamma_A = \sum_{\substack{C \\ (C < A)}} \frac{2e^2 \omega_{AC}^2}{mc^3} \bar{f}_{AC} \frac{1}{1 - e^{-\hbar \omega_{AC}/T}}, \quad (11.21)$$

де величина \bar{f}_{AC} визначена формулою (11.16) і дорівнює силі осцилятора для $A \rightarrow C$ переходу при $\mathbf{k} = 0$. Як бачимо, при дуже високих температурах, коли $\hbar \omega_{AC}/T \ll 1$, стала загасання, внаслідок індукованого випромінювання, зростає лінійно з температурою.

Зробимо ще одне зауваження. Може скластись враження, що ми двічі враховуємо спонтанні переходи. Один раз — у рівнянні переносу, другий — при врахуванні природної ширини спектральної лінії. Насправді це не так. У рівнянні переносу нас цікавлять фотони заданої частоти й поляризації, що рухаються в заданому напрямку. Водночас у сталій загасання (11.1) враховуємо фотони всіх частот при переході атомної системи із стану $|A\rangle$ на всі стани $|C\rangle$ з нижчою енергією. У сталій загасання ми не повинні брати до уваги лише фотони з одним фіксованим значенням q , яке вже враховане в рівнянні переносу. Іншими словами, і в сумі за q в (11.1) ми повинні вилучити внесок цього доданка. Однак при переході від суми до інтеграла внесок однієї точки в цей інтеграл є величиною $\sim 1/V$ і при $V \rightarrow \infty$ він зникає, якщо заповнення цього стану фотонами не макроскопічне (як, наприклад, явище конденсації фотонів, властиве для лазерів).

§ 12. Врахування природної ширини ліній у рівнянні переносу випромінювання

У попередньому параграфі було показано, що ймовірність перебування атома в стані $|A\rangle$ змінюється із часом за експоненціальним законом $\sim \exp(-\gamma_A t)$. Ця квазістаціонарність атомних станів, що є наслідком існування спонтанних переходів, приводить до зсуву частоти випромінювання атома та до розширення

дельтаподібного контуру спектральної лінії й заміни його на контур із лоренцівським профілем. Тепер ми маємо намір урахувати квазістаціонарність станів у виразах для коефіцієнтів поглинання, перерізу розсіяння та функції перерозподілу за частотами, що входять у рівняння переносу випромінювання.

Припустимо, що електрон в атомі під дією деякого збурення (наприклад, міжчастинкової взаємодії або взаємодії з полем) здійснює квантові переходи між деякими станами і ми розраховуємо відповідні ймовірності цих переходів. Причому для розрахунків використовуємо ті самі міркування й рівняння, що й у § 10, оскільки вони мають загальний характер. Слід, однак, пам'ятати, що, крім цих виділених переходів, є спонтанні переходи. Тому у виразі (10.9) величина Γ_i з (10.15) визначатиметься квадратом модуля матричного елемента повного оператора збурення. Якщо знехтувати перехресними ефектами, а при деяких умовах їхній внесок просто дорівнюватиме нулеві, то декремент загасання Γ_i буде визначений сумою двох величин, одна з яких Γ_A відповідає за спонтанні переходи, інша — за виділені.

У зв'язку з тим, що спонтанні переходи існують завжди, ми можемо фактор $\exp(-\Gamma_A t/2)$ від спонтанних переходів в C_i “під'єднати” до хвильової функції атома $\psi_A(\xi, t)$, яка входить у повну хвильову функцію $|i\rangle$. Тепер при всіх обчисленнях, наприклад, при розрахунку матричних елементів, атомна хвильова функція будь-якого стану (крім основного, як стаціонарного) повинна домножуватись на цей фактор, що враховує скінченний час життя цього стану:

$$\psi_A(\xi, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_A + \Delta E_A)t - \frac{\gamma_A}{2}t} \psi_A(\xi). \quad (12.1)$$

Якщо тепер звернутись до вивчення квантових переходів атома під дією зовнішнього електромагнітного поля, то стартові канонічні формули (3.6), (3.8) для ймовірності переходу за одиницю часу необхідно виправити. Для того щоб це здійснити, пригадаймо, що при введенні виразу для ймовірності переходу (див. [8], а також § 10) дельта-функцію $\delta(E_f - E_i)$, яка забезпечує закон збереження енергії, отримуємо в теорії квантових переходів

унаслідок інтегрування за часом часових множників хвильових функцій початкового й кінцевого стаціонарного станів [8]:

$$\begin{aligned}\delta(E_f - E_i) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} dt \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} dt.\end{aligned}\quad (12.2)$$

Тепер за наявності загасаючого із часом множника у хвильових функціях (12.1) таке інтегрування, замість дельта-функції, дає контур Лоренца:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\pi\hbar} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{-(\Gamma_i + \Gamma_f)t/2} e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} dt \\ = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \frac{1}{\hbar(\Gamma_i + \Gamma_f)/2 - i(E_f - E_i)},\end{aligned}\quad (12.3)$$

де

$$\begin{aligned}\frac{\Gamma_i}{2} &= \frac{i}{\hbar} \Delta E_i + \frac{\gamma_i}{2}, \\ \frac{\Gamma_f}{2} &= \frac{i}{\hbar} \Delta E_f + \frac{\gamma_f}{2}.\end{aligned}\quad (12.4)$$

Унаслідок цього дельта-функція, яка стоїть під знаком суми у виразі для коефіцієнта поглинання (6.3), зумовленого зв'язано-зв'язаними переходами, замінюється лоренцівським контуром (12.3):

$$\delta(\omega_{AA'} - \omega) \rightarrow \frac{\gamma_{A'A}/2\pi}{(\omega_{A'A} + \Delta\omega_{A'A} - \omega)^2 + (\gamma_{A'A}/2)^2},\quad (12.5)$$

$$\gamma_{A'A} = \gamma_A + \gamma_{A'}; \quad \Delta\omega_{A'A} = \Delta E_{A'} - \Delta E_A,$$

де $\gamma_{A'A}$ — константа загасання, $\Delta\omega_{A'A}$ — радіаційний зсув частоти переходу. Природна, тобто радіаційна, ширина спектральної лінії $\gamma_{A'A}$ є сумою радіаційних ширин початкового й кінцевого рівнів. Ширини спектральних ліній, зумовлених переходами в основний стан, визначають ширини верхніх рівнів, оскільки рівень основного стану не розмивається (рис. 9).

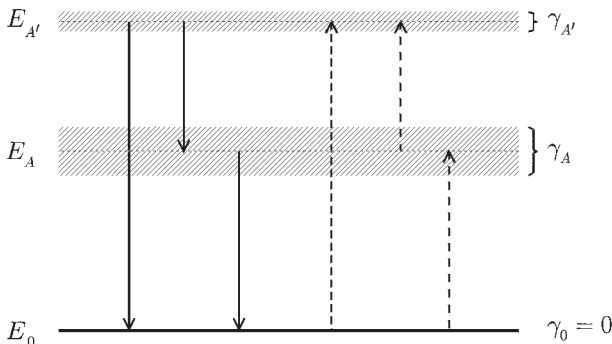


Рис. 9. Енергетичні рівні квазістаціонарних станів атомів. Квантові числа A' , A нумерують збуджені рівні з радіаційними ширинами $\gamma_{A'}$, γ_A . Квантове число 0 позначає основний стан, для якого радіаційна ширина рівня $\gamma_0 = 0$. Суцільними вертикальними лініями зі стрілками показані відібрані спонтанні переходи, штриховими — переходи “вверх”, які за умови, що фотон не зустрів свого атома, перекриті.

Про розширення спектральних ліній є сенс говорити, коли переходи здійснюються між рівнями дискретного спектра. Тому ми можемо вести мову про вплив радіаційного загасання на коефіцієнт поглинання в лінії, коли з трьох можливих каналів реакцій (1.1)–(1.3) беремо до уваги зв'язано-зв'язані переходи.

Отже, виправлений на ефект радіаційного загасання вираз (6.6) для коефіцієнта поглинання набуває вигляду:

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \frac{1}{V} \sum_{\text{(за частинками)}} \sum_{A, A'} \rho_A \times f_{A'A}(q) \frac{\gamma_{A'A}/2\pi}{(\omega_{A'A} + \Delta\omega_{A'A} - \omega)^2 + (\gamma_{A'A}/2)^2}. \quad (12.6)$$

Що стосується функції перерозподілу за частотами (8.4), то, крім заміни дельта-функції на контур Лоренца (12.4), необхідно також виправити й функцію $\Phi_{A'A}(q, q')$, а саме, частоту переходу ω_{AC} в (7.12) необхідно замінити на $\omega_{AC} + \Delta\omega_{AC} - i\gamma_{AC}/2$. Це легко зрозуміти, коли зауважити, що квазістаціонарний стан (12.1) можна формально записати як стаціонарний стан із комплексною енергією $E_A - i\hbar\Gamma_A/2$, а для спряженої хвильової функції йде заміна на $E_A + i\hbar\Gamma_A/2$ [8, 10]. Тому різницю енергій $(E_A - E_C)/\hbar$ замінимо на $[(E_A - i\hbar\Gamma_A/2) - (E_C + i\hbar\Gamma_C/2)]/\hbar = \omega_{AC} + \Delta\omega_{AC} - i\gamma_{AC}/2$. Енергія E_C породжується спряженою хвильовою функцією, тому перед γ_C стоїть знак плюс. Остаточо

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{\omega'}{\omega V} \sum_{(\text{за частинками})_{A,A'}} \sum \rho_A \tilde{\Phi}_{A'A}(q, q') \times \frac{\gamma_{A'A}/2\pi}{(\omega - \omega' - \omega_{A'A} - \Delta\omega_{A'A})^2 + (\gamma_{A'A}/2)^2}, \quad (12.7)$$

$$\tilde{\Phi}_{A'A} = \Phi_{A'A}(q, q') \Big|_{\omega_{AC} \rightarrow \omega_{AC} + \Delta\omega_{AC} - i\gamma_{AC}/2}. \quad (12.8)$$

На завершення вкажемо, що вирази для коефіцієнта поглинання (12.6) та функції перерозподілу за частотами (12.7) є вихідними в наступних розділах при докладному дослідженні явища переносу випромінювання з урахуванням різних фізичних механізмів, які діють у зоряних атмосферах.

РОЗДІЛ III

КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ В ЛІНІЇ

§ 13. Ефект Доплера

Атом, що поглинає або випромінює фотони в атмосфері зорі, бере участь у тепловому русі частинок, а також у турбулентних рухах макроскопічних сукупностей атомів, таких, як локальні вихори, хвильові рухи речовини. Якщо розмір таких утворень є малим порівняно з довжиною вільного пробігу фотона $\lambda(q)^{-1}$, то говорять про мікротурбулентний рух, у протилежному випадку маємо макротурбулентний рух. Унаслідок руху атома частота випромінювання, яку фіксує спостерігач, є зміщеною, причому відносне зміщення дорівнює відношенню швидкості атома, спроектованої на промінь зору (тобто на хвильовий вектор фотона \mathbf{k}), до швидкості світла — ефект Доплера¹. Оскільки компоненти швидкостей частинок в атмосфері зорі є величинами випадковими, то це приводить до розширення контуру спектральної лінії. Теплові швидкості в умовах локальної термодинамічної рівноваги підкорені розподілу Максвелла, а для турбулентних швидкостей також приймають, як правило, гауссівський розподіл.

Нашим завданням є розрахувати коефіцієнт поглинання в лінії з урахуванням ефекту Доплера. Отже, розглянемо окремий

¹Християн Доплер (1803–1853) — австрійський фізик і математик, теоретично вивів залежність частоти звукових і світлових хвиль, які сприймає спостерігач, від швидкості руху джерела хвиль та спостерігача (ефект Доплера); займався теорією кольорів.

Зрозуміло, що тут мова йде про формули в нерелятивістському наближенні, оскільки швидкості атомів у зоряній атмосфері є на декілька порядків меншими від швидкості світла.

атом, що рухається в атмосфері зорі, і на цьому етапі його взаємодію з іншими частинками не братимемо до уваги. Звернімось до загальної формули (12.6) для коефіцієнта поглинання в лінії. Передусім нам необхідно розрахувати величину $f_{A'A}(q)$, яка записана формулою (5.13). Спочатку ми виділимо рух атома як цілого від руху електрона в атомі відносно ядра, покладаючи радіус-вектор електрона в (5.13) рівним

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \mathbf{r}', \quad (13.1)$$

де \mathbf{R} — радіус-вектор центра мас, \mathbf{r}' — радіус-вектор електрона відносно центра мас (фактично відносно ядра атома). Тепер оператор імпульсу

$$\hat{\mathbf{p}} = m\hat{\mathbf{r}} = m\hat{\mathbf{r}}' + m\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{p}}' + \frac{m}{M}\hat{\mathbf{P}}, \quad (13.2)$$

де $\hat{\mathbf{p}}'$ — оператор імпульсу електрона в системі центра мас, а $\hat{\mathbf{P}}$ — оператор імпульсу атома як цілого, M — повна маса атома. Хвильові функції початкового й кінцевого станів відповідно дорівнюють:

$$|A\rangle = \frac{e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}}|a\rangle, \quad (13.3)$$

$$|A'\rangle = \frac{e^{i\mathbf{P}'\mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}}|a'\rangle,$$

де \mathbf{P} — початковий імпульс атома як цілого, а \mathbf{P}' — його імпульс після випромінювання або поглинання фотона; $|a\rangle$ та $|a'\rangle$ — хвильові функції електрона, що описують рух відносно ядра з квантовими числами a та a' . У нерелятивістському наближенні a — це сукупність таких квантових чисел: головного квантового числа n , орбітального — l та магнітного m , і отже, $a = (n, l, m)$. Підсумовування за квантовим числом A — це підсумовування за імпульсом \mathbf{P} та квантовим числом a . Оскільки ми вивчаємо

тут коефіцієнт поглинання в лінії, тобто нас цікавить конкретний квантовий перехід $a \rightarrow a'$, то зрозуміло, що підсумовування за квантовими числами a та a' опускаємо.

Зробимо одне важливе уточнення щодо цього. Якщо стани $|a\rangle$ та $|a'\rangle$ є виродженими, то необхідно залишити підсумовування за квантовими числами, від яких енергія не залежить. Адже ми маємо квантові переходи між тими ж енергетичними рівнями атома. Тобто всі ці вироджені стани формують одну спектральну лінію. Тому у формулах для коефіцієнта поглинання в лінії підсумовування за цими квантовими числами залишається. Однак з метою спрощення запису ми, пам'ятаючи про це, виписувати явно відповідні символи підсумовування не будемо. А в остаточних результатах сили осцилятора потрібно буде брати з відповідним фактором, що враховує виродження.

Переходимо до розрахунку величини $f_{A'A}(q)$:

$$\begin{aligned}
 f_{A'A}(q) &= \frac{2}{m\hbar\omega_{A'A}} \left| \langle A' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | A \rangle \right|^2 \\
 &= \frac{2}{m\hbar\omega_{A'A}} \left| \langle A' | e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}'+\mathbf{R})} \mathbf{e}_q \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{m}{M} \hat{\mathbf{P}} \right) | A \rangle \right|^2 \\
 &= \frac{2}{m\hbar\omega_{A'A}} \left| \langle \mathbf{P}' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} | \mathbf{P} \rangle \right|^2 \quad (13.4) \\
 &\times \left| \langle a' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}') | a \rangle + \frac{m}{M} (\mathbf{e}_q \mathbf{P}) \langle a' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} | a \rangle \right|^2,
 \end{aligned}$$

де матричний елемент

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{P}' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} | \mathbf{P} \rangle &= \frac{1}{V} \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{P}'\mathbf{R}/\hbar} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}/\hbar} \\
 &= \delta(-\mathbf{P}'/\hbar + \mathbf{k} + \mathbf{P}/\hbar) \quad (13.5)
 \end{aligned}$$

є символом Кронекера, що забезпечує виконання закону збереження імпульсу при випромінюванні рухомих атомом фотона з хвильовим вектором \mathbf{k} : $\mathbf{P}' = \mathbf{P} + \hbar\mathbf{k}$. Енергія E_A дорівнює сумі кінетичної енергії атома як цілого $\mathbf{P}^2/2M$ плюс енергія електрона

в атомі E_a , аналогічно і для $E_{A'}$. Тому частота

$$\omega_{A'A} = \frac{E_{A'} - E_A}{\hbar} = \omega_{a'a} + \frac{\mathbf{P}'^2 - \mathbf{P}^2}{2M\hbar}, \quad (13.6)$$

де частота випромінювання атома

$$\omega_{a'a} = \frac{E_{a'} - E_a}{\hbar}.$$

Другим доданком під знаком модуля в (13.4) можна знехтувати з двох причин. По-перше, у наближенні дипольних переходів, коли $\mathbf{kr}' \ll 1$, матричний елемент за атомними станами в ньому дорівнює $\langle a'|a \rangle = \delta_{a'a}$, і оскільки, за умовою, ми розглядаємо переходи з $a' \neq a$, то обговорюваний доданок просто дорівнює нулеві. Якщо беремо до уваги квадрупольні переходи та магнітні дипольні, то цей матричний елемент має малий множник m/M . Точніші міркування є такими. Перший член під знаком модуля як матричний елемент оператора імпульсу електрона за порядком величини $\sim \hbar/a_B$, $a_B = \hbar^2/me^2$ — радіус Бора, а другий пропорційний до $m\sqrt{T/M}$, унаслідок того, що в атмосфері з температурою T імпульс атома $\mathbf{P} \sim \sqrt{MT}$. Тепер очевидно, що $m\sqrt{T/M} \ll \hbar/a_B$, тобто $me^4/\hbar^2 \gg Tm/M$ навіть для температур $T \sim 10^5$ К, оскільки $m/M \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$. Отже, другий доданок у (13.4) під знаком модуля несуттєвий, і надалі ми його не враховуємо.

Для зручності і спрощення записів знімемо штрихи з відносних координати \mathbf{r}' та оператора імпульсу $\hat{\mathbf{p}}'$. Тепер, зважаючи на те, що символ Кронекера дорівнює або нулеві, або одиниці, а отже його квадрат дорівнює йому самому, з (13.4) знаходимо:

$$f_{A'A} = \frac{2}{m\hbar\omega_{A'A}} \left| \langle a'|e^{i\mathbf{kr}}(\mathbf{e}_q\hat{\mathbf{p}})|a \rangle \right|^2 \delta \left(-\frac{\mathbf{P}'}{\hbar} + \mathbf{k} + \frac{\mathbf{P}}{\hbar} \right). \quad (13.7)$$

Переходимо до обчислення коефіцієнта поглинання (12.6). Знову ж таки для простоти запису (щоб не нагромаджувати індекси) будемо розглядати лише один сорт частинок, кількість яких дорівнює N . У цьому випадку сума за частинками в (12.6) дасть

множник N . Якщо система багатосортна, то повний коефіцієнт поглинання дорівнює сумі парціальних коефіцієнтів поглинання, і не виключено, що лінії поглинання різних атомів можуть накладатись. Отже, з урахуванням усього сказаного маємо:

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \\ &\times \sum_{\mathbf{P}'} \sum_{\mathbf{P}} \rho_A \delta\left(-\frac{\mathbf{P}'}{\hbar} + \mathbf{k} + \frac{\mathbf{P}}{\hbar}\right) f_{a'a}(q) \quad (13.8) \\ &\times \frac{\omega_{a'a}}{\omega_{A'A}} \frac{\gamma_{A'A}/2\pi}{(\omega - \omega_{A'A})^2 + (\gamma_{A'A}/2)^2}, \end{aligned}$$

де величину

$$f_{a'a}(q) = \frac{2}{m\hbar\omega_{a'a}} \left| \langle a' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | a \rangle \right|^2 \quad (13.9)$$

розраховуємо для нерухомого атома (тобто коли “сісти” на його центр мас) і, як ми вже знаємо, при $\mathbf{k} = 0$ вона дорівнює силі осцилятора для переходу $a' \rightarrow a$. Імовірність ρ_A перебування атома в стані $|A\rangle$ з (4.8) унаслідок того, що енергія $E_A = E_a + \mathbf{P}^2/2M$, факторизується:

$$\rho_A = \frac{e^{-E_A/T}}{Z} = \rho_a \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{\sum_{\mathbf{P}} e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}, \quad (13.10)$$

де ймовірність перебування нерухомого атома в стані $|a\rangle$

$$\rho_a = \frac{e^{-E_a/T}}{\sum_a e^{-E_a/T}}. \quad (13.11)$$

Частота (13.6)

$$\omega_{A'A} = \omega_{a'a} + \frac{(\mathbf{P} + \hbar\mathbf{k})^2 - \mathbf{P}^2}{2M\hbar} = \omega_{a'a} + \frac{\mathbf{k}\mathbf{P}}{M} + \frac{\hbar k^2}{2M}, \quad (13.12)$$

і оскільки $k^2 = \omega^2/c^2$, то останнім доданком можна знехтувати: $\hbar k^2/2M\omega = \hbar\omega/2Mc^2 \ll 1$. У виразах $\omega_{a'a}/\omega_{A'A}$ та $\gamma_{A'A}$ в коефіцієнті поглинання (13.8) можна знехтувати і другим доданком у (13.12), який $\sim P/Mc \ll 1$, і отже, $\omega_{a'a}/\omega_{A'A} = 1$, $\gamma_{A'A} = \gamma_{a'a}$.

Підсумовування за імпульсом \mathbf{P}' в (13.8) знімає символ Кронекера, вимагаючи, щоб $\mathbf{P}' = \mathbf{P} + \hbar\mathbf{k}$, а підсумовування за імпульсом \mathbf{P} в (13.8) та (13.10) замінюємо при переході до макроскопічного об'єму V інтегралами, як це зроблено для хвильових векторів в (2.1):

$$\sum_{\mathbf{P}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{P}, \quad (13.13)$$

причому

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{P}} e^{-\mathbf{P}^2/2MT} &\rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\mathbf{P}^2/2MT} d\mathbf{P} \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-P_x^2/2MT} dP_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-P_y^2/2MT} dP_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-P_z^2/2MT} dP_z \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi MT)^{3/2}. \end{aligned} \quad (13.14)$$

У результаті для коефіцієнта поглинання в лінії маємо:

$$\begin{aligned} \varkappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \rho_a f_{a'a}(q) \\ &\times \int d\mathbf{P} \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}} \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0 - \mathbf{kP}/M)^2 + (\gamma/2)^2}, \end{aligned} \quad (13.15)$$

де введено скорочені позначення

$$\gamma = \gamma_{a'a}, \quad \omega_0 = \omega_{a'a}. \quad (13.16)$$

Інтегрування за \mathbf{P} у виразі (13.15) — це інтегрування за P_x , P_y та P_z . Якщо спрямувати вісь z уздовж вектора \mathbf{k} , то інтегрування

за P_x, P_y дає $2\pi MT$, як і в (13.14):

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \rho_a f_{a'a}(q) \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dP_z \frac{e^{-P_z^2/2MT}}{(2\pi MT)^{1/2}} \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0 - kP_z/M)^2 + (\gamma/2)^2}, \end{aligned} \quad (13.17)$$

В інтегралі за P_z , що залишається, робимо заміну змінної $P_z = x\sqrt{2MT}$ і в результаті знаходимо остаточно

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \rho_a f_{a'a}(q) \frac{H(\alpha, v)}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}}, \quad (13.18)$$

де функція

$$H(\alpha, v) = \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{(v-x)^2 + \alpha^2} dx, \quad (13.19)$$

$$\alpha = \frac{\gamma}{2\Delta\omega_D}, \quad v = \frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega_D}, \quad (13.20)$$

$$\Delta\omega_D = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{2T}{M}}$$

— доплерівський зсув частоти. Зважаючи на близькість частот ω та ω_0 , у вираз для доплерівського зсуву замість ω ставимо ω_0 . Функція $H(\alpha, v)$ є нічим іншим, як згортокою функції Гауса, що визначає максвеллівський розподіл атомів за швидкостями, з функцією Лоренца. Часто функцію $H(\alpha, v)$ називають функцією Фойгта². Вона відіграє центральну роль у дослідженнях розширення спектральних ліній (див., наприклад, [7]).

²Уперше спільну дію ефекту Доплера та радіаційного загасання на розширення спектральних ліній атомів досліджував ще в 1912 році німецький фізик-теоретик Вольдемар Фойгт (1850–1919). Цікаво також знати, що він у 1887 році перший увів перетворення для просторових та часових змінних, які залишають незмінними рівняння електродинаміки. Їх пізніше вивів також нідерландський фізик-теоретик Г. Лоренц, і вони відомі тепер як перетворення Лоренца. Саме ці перетворення поклали початок теорії відносності.

На завершення цього параграфу наведемо вираз для коефіцієнта поглинання залежно від довжини хвилі λ :

$$\kappa_{\lambda}(q) = \frac{\sqrt{\pi} e^2 \lambda_0^2 N}{m c^2 \Delta \lambda_D V} \left(1 - e^{-2\pi c \hbar / \lambda T} \right) \rho_a f_{a'a}(q) H(\alpha, v), \quad (13.21)$$

$$\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0}, \quad \Delta \lambda_D = \frac{\lambda_D^2}{2\pi c} \Delta \omega_D = \frac{\lambda_0}{c} \sqrt{\frac{2T}{M}}, \quad (13.22)$$

$$\alpha = \frac{\gamma \lambda}{2\Delta \lambda_D}, \quad \gamma \lambda = \gamma \frac{\lambda_0^2}{2\pi c},$$

$$v = \frac{(\lambda - \lambda_0)}{\Delta \lambda_D}.$$

Ці вирази отримуємо елементарними перетвореннями з використанням зв'язку $\lambda = 2\pi c / \omega$, і вони не потребують коментарів.

§ 14. Розширення спектральних ліній турбулентними рухами в зоряній атмосфері

Якщо атом бере участь у турбулентному русі атмосфери зі швидкістю \mathbf{v} , то в системі відліку, у якій ми працюємо, де зоря як ціле є нерухомою, до його імпульсу \mathbf{P} в початковому стані (13.3) необхідно додати імпульс $M\mathbf{v}$, пов'язаний із цим рухом, $\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P} + M\mathbf{v}$. Частота з (13.6)

$$\omega_{A'A} = \omega_{a'a} + \frac{\mathbf{k}(\mathbf{p} + M\mathbf{v})}{M} + \frac{\hbar k^2}{2M}.$$

Для макротурбулентного руху з фіксованою швидкістю \mathbf{v} це приведе до заміни в знаменнику підінтегрального виразу в (13.15) імпульсу \mathbf{P} на $\mathbf{P} + M\mathbf{v}$, і матимемо зсув спостережуваної частоти на $\mathbf{k}\mathbf{v}$.

Зовсім інша ситуація виникає при мікротурбулентному русі. Унаслідок того, що на шляху до спостерігача фотон проходить

крізь флюктуаційні утворення атмосфери, що рухаються з різними швидкостями \mathbf{v} , ми повинні здійснити додаткове усереднення коефіцієнта поглинання за функцією розподілу мікротурбулентних швидкостей $w(\mathbf{v})$. Тобто початковий стан атома $|A\rangle$ характеризується тепер таким набором величин: квантовим числом a , імпульсом теплового руху \mathbf{P} , швидкістю \mathbf{v} , отже $A = (a, \mathbf{P}, \mathbf{v})$. Підсумовування за A ми повинні тепер розуміти ще й як додаткове усереднення за швидкостями з нормованою функцією $w(\mathbf{v})$:

$$\int w(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1. \quad (14.1)$$

Імовірність перебування атома в стані $|A\rangle$ тепер дорівнює:

$$\rho_A = \rho_a w(\mathbf{v}) \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}}.$$

Таким чином, коефіцієнт поглинання в лінії (13.15) з урахуванням мікротурбулентності набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \rho_a f_{a'a}(q) \\ &\times \int d\mathbf{v} w(\mathbf{v}) \int d\mathbf{P} \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}} \\ &\times \frac{\gamma/2\pi}{[\omega - \omega_0 - \mathbf{k}(\mathbf{P} + M\mathbf{v})/M]^2 + (\gamma/2)^2}. \end{aligned} \quad (14.2)$$

Механізм формування функції розподілу мікротурбулентних швидкостей є складним, і можна сподіватись хіба що на достатньо вдалу модель $w(\mathbf{v})$. Її моделюють, як правило, гауссівською функцією

$$w(\mathbf{v}) = \frac{e^{-\mathbf{v}^2/v_0^2}}{(\pi v_0^2)^{3/2}} \quad (14.3)$$

з деяким параметром v_0 , квадрат якого $v_0^2 = 2\langle v_z^2 \rangle$, де $\langle v_z^2 \rangle$ є середньоквадратичною турбулентною швидкістю уздовж певного напрямку, наприклад, уздовж осі z . Повна середня квадратична швидкість $\langle \mathbf{v}^2 \rangle = 3v_0^2/2$. Узагалі кажучи, у різних напрямках параметр v_0 повинен бути іншим, причому за порядком величини $v_0 \sim 10^3$ м/сек. Для нас це не суттєво, оскільки ми цікавимося напрямком уздовж променя зору. Очевидно також, що цей параметр залежить від координати точки простору, тобто $v_0 = v_0(x, y, z)$, і необхідно говорити про поле турбулентних швидкостей³. За додатковою інформацією про нетеплові рухи в зоряних атмосферах відсилаємо Читача до [6, 7, 15], а також до книжки [16], яку написав колектив авторів і в якій є багато фактичного матеріалу про атмосфери зір різних типів, зібраного до 1960 року.

Як і в попередньому параграфі при інтегруванні за \mathbf{v} та \mathbf{P} , у (14.2) виберемо вісь z уздовж променя зору, тобто вздовж хвильового вектора фотона \mathbf{k} , і виконаємо інтегрування за змінними v_x, v_y та P_x, P_y :

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \rho_a f_{a'a}(q) \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \frac{e^{-v_z^2/v_0^2}}{\sqrt{\pi}v_0} \int_{-\infty}^{\infty} dP_z \frac{e^{-P_z^2/2MT}}{\sqrt{2\pi MT}} \\ &\times \frac{\gamma/2\pi}{[\omega - \omega_0 - k(P_z + Mv_z)/M]^2 + (\gamma/2)^2}. \end{aligned} \quad (14.4)$$

Замість P_z уведемо нову змінну інтегрування $P'_z = P_z + Mv_z$ (також із безмежними межами), і у нас виникає можливість узяти

³Турбулентність у зоряних атмосферах виявили О. Струве та К. Елві у 1934 році, застосувавши для дослідження зір так званий метод кривих росту, який було розроблено для Сонця.

інтеграл за змінною v_z як згортку двох гауссівських функцій⁴:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \frac{e^{-v_z^2/v_0^2}}{\sqrt{\pi}v_0} \frac{e^{-(P'_z - Mv_z)^2/2MT}}{\sqrt{2\pi MT}} \\
 &= \frac{e^{-P_z'^2/2MT}}{\sqrt{2\pi MT}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \frac{e^{-v_z^2(1/v_0^2 + M/2T) + v_z P'_z/T}}{\sqrt{\pi}v_0} \quad (14.5) \\
 &= \frac{e^{-P_z'^2/2MT^*}}{\sqrt{2\pi MT^*}},
 \end{aligned}$$

де ефективна температура

$$T^* = T + \frac{Mv_0^2}{2}. \quad (14.6)$$

У результаті

$$\begin{aligned}
 \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \rho_a f_{a'a}(q) \quad (14.7) \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} dP'_z \frac{e^{-P_z'^2/2MT^*}}{\sqrt{2\pi MT^*}} \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0 - kP'_z/M)^2 + (\gamma/2)^2},
 \end{aligned}$$

і отже, бачимо, що перед нами вираз, який збігається з формулою (13.17), якщо в ній температуру T замінити на ефективну температуру T^* .

Тому остаточний вираз для коефіцієнта поглинання, контур якого розширений радіаційним загасанням, тепловим рухом атомів та мікротурбулентністю, також збігається з виразом (13.18) за умови, що в доплерівський зсув частоти $\Delta\omega_D$, що входить у

⁴ Для інтегрування використовуємо добре відомий інтеграл:
 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\pi/a} e^{b^2/4a}, \quad \text{Re } a > 0.$

вираз для $\kappa(q)$ та функцію Фойгта (13.19), замість температури T , покладемо ефективну температуру T^* :

$$\Delta\omega_D = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{2T^*}{M}} = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{2}{M} \left(T + \frac{Mv_0^2}{2} \right)}. \quad (14.8)$$

Ми можемо запитати, наскільки важливо враховувати мікротурбулентні рухи. Для цього зробимо оцінку енергії $Mv_0^2/2$ в ґрадусах (тобто поділімо її на сталу Больцмана). Неважко прикинути, що якщо v_0 складає кілька кілометрів за секунду, то навіть для найлегшого з атомів, атома водню, $Mv_0^2/2 \sim 10^3$ К. Отже, ця величина одного порядку з температурою T в атмосфері зорі, тому врахування мікротурбулентних рухів при розрахунку розширення контуру коефіцієнта поглинання в спектральній лінії є важливим.

Тепер ще раз повернімось до аналізу впливу макротурбулентних рухів в атмосфері зорі на профілі ліній. Як уже було сказано на початку параграфу, спостереження за випромінюванням з окремого великомасштабного елемента зорі, який рухається уздовж променя зору зі швидкістю v_z , фіксує лише зміщення частоти випромінювання на величину $\omega_0 v_z/c$. Отже, розв'язок рівняння переносу випромінювання для такого окремого ґранульного елемента дає в інтенсивності $I_{\mathbf{k},\alpha}$ як функції різниці частот $(\omega - \omega_0)$, замість резонансної частоти ω_0 , зміщену частоту $\omega_0 + \omega_0 v_z/c$:

$$I_{\mathbf{k},\alpha} = I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega_0 - \omega_0 v_z/c). \quad (14.9)$$

Таке зміщення частоти, зрозуміло, не викликає зміни еквівалентної ширини лінії W_{λ_0} . Тобто площа під кривою глибини лінії в означенні (2.11) залишається незмінною — просто весь спектр випромінювання цього макроскопічного утворення зсувається на сталу величину $\omega_0 v_z/c$.

Спостереження за випромінюванням з окремого макроскопічного елемента можливе лише для Сонця. Для інших зір ми бачимо ефект усереднений за цими макротурбулентними швидкостями ґранул. Важливим, однак, є те, що еквівалентна ширина лінії в цьому випадку не зазнає зміни. Доведемо це твердження.

Нехай функція $w_{\text{mac}}(v_z)$ задає розподіл за швидкостями цих макроскопічних великомасштабних утворень за напрямком до спостерігача. Усереднена інтенсивність, яку ми будемо позначати гострими ламаними дужками, дорівнює

$$\langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w_{\text{mac}}(v_z) I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega_0 - \omega_0 v_z/c) dv_z, \quad (14.10)$$

причому, згідно з означенням, функцію $w_{\text{mac}}(v_z)$ нормуємо на одиницю:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_{\text{mac}}(v_z) dv_z = 1. \quad (14.11)$$

За допомогою дельта-функції вираз (14.10) можна записати так:

$$\begin{aligned} \langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dv_z w_{\text{mac}}(v_z) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega') \\ &\times \delta(\omega' - \omega_0 - \omega_0 v_z/c) \end{aligned} \quad (14.12)$$

або

$$\begin{aligned} \langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega') P(\omega' - \omega_0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega' - \omega_0 - \omega'') P(\omega''), \end{aligned} \quad (14.13)$$

де спектральна функція макротурбулентних рухів

$$P(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dv_z w_{\text{mac}}(v_z) \delta(\omega - \omega_0 v_z/c). \quad (14.14)$$

Дельта-функція знімає в (14.14) інтегрування, тому

$$P(\omega) = \frac{c}{\omega_0} w_{\text{mac}} \left(c \frac{\omega}{\omega_0} \right). \quad (14.15)$$

Спектральна функція $P(\omega)$ також нормована на одиницю. Справді, з означення (14.14) маємо:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega &= \int_{-\infty}^{\infty} dv_z w_{\text{mac}}(v_z) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta(\omega - \omega_0 v_z/c) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dv_z w_{\text{mac}}(v_z) = 1. \end{aligned} \quad (14.16)$$

Можна використати і явний вигляд $P(\omega)$ через w_{mac} з (14.15):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{c}{\omega_0} w_{\text{mac}} \left(c \frac{\omega}{\omega_0} \right) d\omega \\ &= \left(\text{заміна : } x = c\omega/\omega_0 \right) = \int_{-\infty}^{\infty} w_{\text{mac}}(x) dx = 1. \end{aligned}$$

Глибина спектральної лінії, згідно з означенням, у нашому випадку дорівнює

$$\tilde{r}_\lambda = \frac{I_\lambda^c - \sphericalangle I_\lambda^l \sphericalangle}{I_\lambda^c}. \quad (14.17)$$

Отже, цим рівнянням ми визначаємо глибину лінії зі спотвореним макротурбулентними рухами контуром. Оскільки інтегрування в означенні (2.11) еквівалентної ширини йде фактично в межах лінії з центром при $\lambda = \lambda_0$, де I_λ^c є величиною сталою, то глибину лінії можна покласти рівною

$$\tilde{r}_\lambda = \tilde{r}_{\lambda_0}(\Delta\lambda) = \frac{I_{\lambda_0}^c - \sphericalangle I_\lambda^l \sphericalangle}{I_{\lambda_0}^c}, \quad (14.18)$$

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0.$$

Ми явно позначаємо тут, що глибина лінії залежить від відстані $\Delta\lambda$ до центра лінії λ_0 .

Підрахуймо тепер еквівалентну ширину, користуючись частотною шкалою (2.16):

$$\begin{aligned}\widetilde{W}_{\lambda_0} &= \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\omega) \tilde{r}_{\omega_0}(\Delta\omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\omega) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' P(\omega'') r_{\omega_0}(\Delta\omega - \omega''), \quad (14.19)\end{aligned}$$

де

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0.$$

Ми скористались другим виразом (14.13) для інтенсивності в лінії в означенні її глибини. Інтегруємо спочатку за змінною $\Delta\omega$ і отримуємо, згідно з (2.16), еквівалентну ширину неспотвореної лінії W_{λ_0} , після чого інтеграл за ω'' стосується лише спектральної функції і дає одиницю:

$$\begin{aligned}\widetilde{W}_{\lambda_0} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' P(\omega'') \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\omega) r_{\omega_0}(\Delta\omega - \omega'') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' P(\omega'') \int_{-\infty}^{\infty} dx r_{\omega_0}(x) \\ &= W_{\lambda_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' P(\omega'') = W_{\lambda_0}.\end{aligned}$$

Отже, ми отримали важливий результат:

$$\widetilde{W}_{\lambda_0} = W_{\lambda_0}. \quad (14.20)$$

Тобто макротурбулентні рухи деформують контури спектральних ліній, але не змінюють їхніх еквівалентних ширин. Математичним механізмом цього, як легко зауважити, є те, що спостережувана інтенсивність $\prec I_{\lambda}^l \succ$ дорівнює згортці (14.13) інтенсивності $I_{k,\alpha}$ зі спектральною функцією $P(\omega)$ макротурбулентних рухів.

На завершення варто сказати про те, що мікро- та макротурбулентні швидкості введені в теорію зоряних атмосфер феноменологічним шляхом, а їх значення весь час уточнюються. Визначення поля турбулентних швидкостей є предметом спеціального дослідження, приклади впливу мікро- та макротурбулентних швидкостей на профілі фраунгоферових ліній наведено в [18].

§ 15. Функція Фойґта

Як ми бачили, розрахунок коефіцієнта поглинання в лінії потребує обчислення функції Фойґта (13.19), тобто згортки доплерівського й лоренцівського контурів. Тому притичним до двох попередніх параграфів було б дослідження цієї функції. На перший погляд, здається, що знаходження функції $H(\alpha, v)$ не є особливо складним, а інтеграл, який її зображує, легко піддається обчисленню наближеними методами. Однак на розрахунок функції $H(\alpha, v)$ були зосереджені зусилля багатьох дослідників, і на сьогодні з цього приводу існує справді, за словами А. Унзольда, “вавілонське стовпотворіння літератури” [1]. Сучасні комп’ютери дають змогу порахувати функцію Фойґта дійсно без особливих зусиль у кожній точці зоряної атмосфери. Тому ми не маємо наміру проводити тут детальні розрахунки цієї функції.

Однак, бодай з методичних міркувань, ми не можемо зовсім оминати обговорення функції, яка впродовж багатьох років була об’єктом прискіпливої уваги дослідників механізмів розширення спектральних ліній атомів. Подамо декілька інтегральних зображень функції $H(\alpha, v)$ та зображень рядами, дослідимо асимптотичні вирази й нарешті зведемо її до добре вивченого і протабульованого інтеграла ймовірностей комплексного аргументу.

Стартуємо з означення (13.19). Насамперед простою заміною змінної інтегрування x на $(-x)$ знаходимо, що

$$H(\alpha, v) = H(\alpha, -v). \quad (15.1)$$

Іншими словами, контур коефіцієнта поглинання (13.18) є симетричним щодо частоти $\omega = \omega_0$, при якій $v = 0$.

Далі, як випливає з означення,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} H(\alpha, v) dv &= \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{(v-x)^2 + \alpha^2} \\ &= \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y^2 + \alpha^2}, \end{aligned}$$

тут зроблено заміну змінної інтегрування $v - x = y$. Інтеграл за x дає $\sqrt{\pi}$, а інтеграл за y дорівнює π/α . Отже, маємо умову нормування для функції Фойгта:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(\alpha, v) dv = \sqrt{\pi}. \quad (15.2)$$

Спрямуймо аргумент α до нуля і скористайтесь тим, що

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha/\pi}{y^2 + \alpha^2} = \delta(y)$$

дає дельта-функцію Дірака, яка знімає в (13.19) інтегрування за x , і ми отримуємо доплерівський контур

$$H(\alpha = 0, v) = e^{-v^2} = e^{-(\omega - \omega_0)^2 / \Delta\omega_D^2}. \quad (15.3)$$

Піддамо тепер вираз (13.19) деяким простим перетворенням⁵:

$$H(\alpha, v) = \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-x^2}}{(v-x)^2 + \alpha^2}$$

⁵ Ми використовуємо тут оператор зсуву. Нехай для деякої функції $f(x)$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} e^{-xd/dv} \frac{1}{v^2 + \alpha^2} \\
&= (\text{див. виноску}) \\
&= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{(d/dv)^2/4} \frac{1}{v^2 + \alpha^2}. \tag{15.4}
\end{aligned}$$

Операторну експоненту треба розуміти як ряд Тейлора:

$$H(\alpha, v) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 4^n \left(\frac{d}{dv} \right)^{2n} \frac{1}{v^2 + \alpha^2}. \tag{15.5}$$

Звичайним диференціюванням знайдемо декілька перших членів цього ряду:

$$\begin{aligned}
H(\alpha, v) &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{v^2 + \alpha^2} \left[1 + \frac{3v^2 - \alpha^2}{2(v^2 + \alpha^2)^2} \right. \\
&+ \frac{3(5v^4 - 10v^2\alpha^2 + \alpha^4)}{4(v^2 + \alpha^2)^4} \\
&+ \frac{15(7v^6 - 35v^4\alpha^2 + 21v^2\alpha^4 - \alpha^6)}{8(v^2 + \alpha^2)^6} \\
&+ \left. \frac{105(9v^8 - 84v^6\alpha^2 + 126v^4\alpha^4 - 36v^2\alpha^6 + \alpha^8)}{16(v^2 + \alpha^2)^8} + \dots \right]. \tag{15.6}
\end{aligned}$$

маємо розклад у ряд Тейлора ($a = \text{const}$):

$$\begin{aligned}
f(x+a) &= f(x) + \frac{df(x)}{dx}a + \frac{1}{2!} \frac{d^2f(x)}{dx^2}a^2 + \dots \\
&= \left(1 + a \frac{d}{dx} + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2}{dx^2} + \dots \right) f(x) = e^{a \frac{d}{dx}} f(x).
\end{aligned}$$

Тобто функцію $f(x)$ зі зсунутим на сталу величину a аргументом можна отримати як результат дії на неї оператора зсуву $e^{ad/dx}$.

Ведучий член цього ряду при $v \rightarrow \infty$ з точністю до множника є контуром Лоренца:

$$H(\alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\alpha}{v^2 + \alpha^2}. \quad (15.7)$$

Отже, контур лінії далеко від центра, тобто її крило, визначає лоренцівська складова функції Фойґта, а за центральну частину контура відповідає доплерівський механізм розширення. Зауважимо, що (15.7), як і (15.3), задовольняє умову нормування (15.2).

Використаймо рівність

$$\frac{\alpha}{(v-x)^2 + \alpha^2} = \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt e^{-\alpha t + i(v-x)t}$$

і підставмо її в означення (13.19) функції $H(\alpha, v)$:

$$\begin{aligned} H(\alpha, v) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\infty} dt e^{-\alpha t + i(v-x)t - x^2} \\ &= \left(\text{інтегруємо за } x: \text{ див. виноску на стор. 94} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t + i v t}. \end{aligned} \quad (15.8)$$

Отже, маємо таке зображення функції Фойґта:

$$H(\alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t} \cos vt. \quad (15.9)$$

Запропонуємо ще одне зображення інтегралом функції $H(\alpha, v)$. Звернімось до нашої вихідної формули (13.19) і розбиймо інтеграл на два: один з межами від 0 до ∞ , а другий — від $(-\infty)$ до

0, у якому робимо заміну змінної інтегрування x на $(-x)$. Після цього інтегруємо частинами:

$$\begin{aligned}
 H(\alpha, v) &= \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{(v-x)^2 + \alpha^2} dx \\
 &= \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{\infty} dx e^{-x^2} \left[\frac{1}{(v-x)^2 + \alpha^2} + \frac{1}{(v+x)^2 + \alpha^2} \right] \\
 &= \frac{1}{\pi} \left[-\operatorname{arctg} \left(\frac{v-x}{\alpha} \right) + \operatorname{arctg} \left(\frac{v+x}{\alpha} \right) \right] e^{-x^2} \Big|_0^{\infty} \\
 &\quad + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{v-x}{\alpha} \right) + \operatorname{arctg} \left(\frac{v+x}{\alpha} \right) \right] dx. \quad (15.10)
 \end{aligned}$$

Перший доданок дорівнює нулеві, а в другому, інтегральному, використаємо формули з елементарної математики для різниці обернених тригонометричних функцій — і остаточно отримаємо:

$$H(\alpha, v) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} x e^{-x^2} \operatorname{arctg} \left(\frac{2\alpha x}{\alpha^2 + v^2 - x^2} \right) dx. \quad (15.11)$$

Нарешті зведемо функцію Фойґта до інтеграла ймовірностей, який добре вивчений. Skorистаймось означенням інтеграла ймовірностей [19]:

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-x^2} dx.$$

Це так званий додатковий інтеграл ймовірностей (звичайний має нижню межу нуль, а верхню — z).

Звернімось до формули (15.8), у якій робимо заміну змінної інтегрування

$$\frac{t}{2} + z = x,$$

$$z = \alpha - iv$$

і знаходимо

$$H(\alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \left(2e^{z^2} \int_z^{\infty} dx e^{-x^2} \right) = \operatorname{Re} \left(e^{z^2} \operatorname{erfc}(z) \right). \quad (15.12)$$

Скористайтесь означенням функції

$$w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz), \quad (15.13)$$

яка протабульована в [19]. Далі покладімо в (15.11)

$$z = -iz_1,$$

$$z_1 = v + i\alpha \quad (15.14)$$

і знайдемо, що

$$H(\alpha, v) = \operatorname{Re} w(z_1) = \operatorname{Re} w(v + i\alpha). \quad (15.15)$$

Мабуть, для відшукування чисельних значень це найзручніше зображення, оскільки дійсна й уявна частини функції $w(z)$ протабульовані в [19] з кроком 0.1 за v і α в межах: $0 \leq \alpha \leq 3$, $0 \leq v \leq 3.9$. Для неї існують також різні апроксимації і зв'язки з іншими спеціальними функціями. Хоча для інтегрування рівняння переносу випромінювання, під час якого необхідно мати значення коефіцієнта поглинання в будь-якій точці атмосфери і для будь-якої частоти, тобто для будь-яких значень величин α та v (це залежить від методу інтегрування й відповідного кроку змінної інтегрування), потрібно щораз брати один з інтегралів, який зображує функцію $H(\alpha, v)$.

Для ілюстрації на рис. 10 наводимо графік $H(\alpha, v)$ як функції $v = (\omega - \omega_0)/\Delta\omega_D$ для різних значень параметра α , який визначає стала загасання γ .

Формула (15.12) дає змогу знайти ще одне зображення функції Фойґта у вигляді ряду. Справді, з (15.12) маємо:

$$H(\alpha, v) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \left[e^{z^2} \left(\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx - \int_0^z e^{-x^2} dx \right) \right].$$

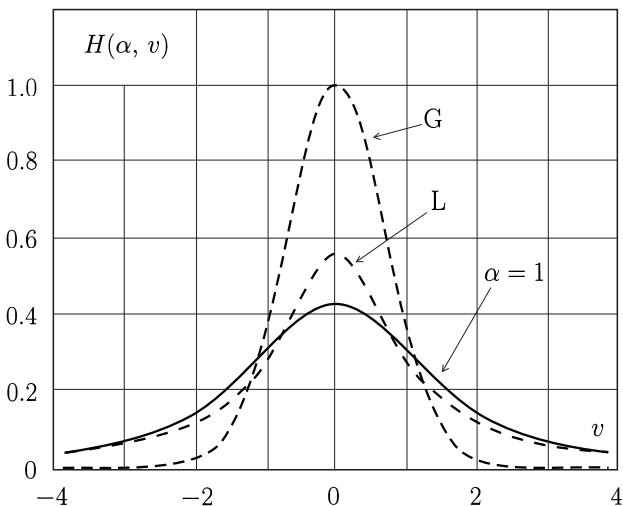


Рис. 10. Функція Фойгта. Суцільна крива — функція $H(\alpha = 1, v)$; пунктирна крива G — розподіл Гауса $H(\alpha = 0, v)$ (15.3); пунктирна крива L — контур Лоренца (15.7) при $\alpha = 1$.

Перший інтеграл дорівнює $\sqrt{\pi}/2$, а в другому розкладаємо експоненту під інтегралом у ряд та інтегруємо:

$$H(\alpha, v) = \operatorname{Re} \left[e^{z^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n z^{2n+1}}{n! (2n+1)} \right) \right]. \quad (15.16)$$

Далі,

$$z = |z|e^{-i\varphi}, \quad |z| = \sqrt{\alpha^2 + v^2}, \quad \varphi = \operatorname{arctg} \frac{v}{\alpha},$$

$$z^2 = \alpha^2 - v^2 - 2i\alpha v.$$

Тепер з (15.16) легко знаходимо таке зображення:

$$H(\alpha, v) = e^{\alpha^2 - v^2} \left\{ \cos(2\alpha v) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n (\alpha^2 + v^2)^{n+1/2}}{n! (2n+1)} \right. \\ \left. \times \cos[2\alpha v + \varphi(2n+1)] \right\}. \quad (15.17)$$

Декілька простих перетворень у (5.17)

$$(-)^{n+1} \cos x = \cos[x + \pi(n + 1)] = -\sin[x + \pi(2n + 1)/2]$$

і отже,

$$\begin{aligned} (-)^{n+1} \cos[2\alpha v + \varphi(2n + 1)] &= -\sin[2\alpha v + (\varphi + \pi/2)(2n + 1)] \\ &= \sin[2\alpha v - (\varphi + \pi/2)(2n + 1)], \end{aligned}$$

а

$$\operatorname{tg}\left(\varphi + \frac{\pi}{2}\right) = -\operatorname{ctg}\varphi = -\frac{1}{\operatorname{tg}\varphi} = -\frac{\alpha}{v}$$

дають із використанням (15.1) ще один ряд, яким ліпше послуговуватися при малих значеннях параметра α :

$$\begin{aligned} H(\alpha, v) &= e^{\alpha^2 - v^2} \left\{ \cos(2\alpha v) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^2 + v^2)^{n+1/2}}{n!(2n + 1)} \right. \\ &\quad \left. \times \sin[2\alpha v + \varphi'(2n + 1)] \right\}, \end{aligned} \quad (15.18)$$

де

$$\varphi' = \operatorname{arctg}\left(\frac{\alpha}{v}\right).$$

Ряди (15.17) та (15.18) можна ще й далі “вдосконалювати” для поліпшення їх збіжності та використовувати, як і (15.6), замість інтегральних зображень функції Фойгта під час розв’язку рівняння переносу випромінювання. Ми залишаємо це Читачеві.

§ 16. Міжчастинкова взаємодія й розширення спектральних ліній

Досі ми розглядали атом, що поглинає або випромінює світло як ізольований, тобто вільний від оточення. Розширення його спектральних ліній було зумовлене радіаційним ефектом та

ефектом Доплера. Урахування цих механізмів розширення ліній було лише першим кроком до побудови повної теорії. Ми бажаємо тепер зробити наступний крок і взяти до уваги взаємодію вибраного атома з навколишніми частинками. Ця взаємодія спричинює зміщення частоти випромінювання атома та розширення ліній.

Зрозуміло, що вплив оточення залежить від середньої відстані між частинками: чим вона менша, тим інтенсивніша взаємодія між ними та атомом. Оскільки середня відстань між частинками залежить від їхньої концентрації, яка своєю чергою залежна від тиску в системі, то про таке розширення ліній часто говорять як про розширення тиском.

Той факт, що така система як зоряна атмосфера є достатньо розрідженою, значно спрощує побудову теорії розширення спектральної лінії, зумовленого міжчастинковою взаємодією.

Ми розглянемо два підходи, що моделюють механізм розширення тиском. Перший ґрунтується на тому, що електрон в атомі, спектральну лінію якого ми вивчаємо, має швидкість порядку $e^2/\hbar = ce^2/\hbar c \simeq c/137$, що значно перевищує швидкості теплового руху збурюючих частинок $\sim \sqrt{2T/M}$; отже, $e^2/\hbar \gg \sqrt{2T/M}$. Справді, швидкості електрона в атомі відповідає температура T_0 , при якій

$$\frac{e^2}{\hbar} = \sqrt{\frac{2T_0}{M}},$$

або

$$T_0 = \frac{M}{m} \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{M}{m} \text{Ry},$$

де енергія в один рідберг

$$1 \text{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV},$$

а в ґрадусах Кельвіна

$$1 \text{Ry} = 1.579 \times 10^5 \text{ K}.$$

Якщо за M взяти масу атома водню, кількість якого в зоряній атмосфері на декілька порядків більша, ніж інших частинок, то

$T_0 \sim 10^8$ К, що значно перевищує температуру фотосфери. Отже, можна вважати, що електронні рухи “миттєво” відстежують повільні зміни положень збурюючих частинок. Іншими словами, при дослідженні впливу на рух електрона збурення від оточуючих частинок їх можна вважати нерухомими. Ця гіпотеза подібна до тієї, яку приймають при побудові теорії молекул, і відповідає так званому адіабатичному наближенню. У цьому наближенні спочатку розраховують електронні стани в молекулі при нерухомих ядрах, а кінетична енергія ядер виступає як мале збурення.

Отже, насамперед розраховуємо енергетичні рівні електрона E_a у вибраному атомі з урахуванням зсуву від оточуючих його частинок з деякою фіксованою конфігурацією і підставляємо знайдені значення E_a у вираз (13.18) для коефіцієнта поглинання $\kappa(q)$. Після цього усереднимо $\kappa(q)$ за всіма можливими конфігураціями з деякою функцією розподілу, яку в умовах локальної термодинамічної рівноваги визначає розподіл Гіббса.

Такий підхід до розрахунку розширення ліній називають статистичним. На наш погляд, ця назва, що утвердилась історично, невдала, оскільки статистичним, тобто залежним від стану багатьох частинок, можна назвати й доплерівське розширення спектральних ліній. Ліпше підходить також часто вживана назва “квазістатичне розширення”, що відображає існування повільних рухів збурюючих частинок. Назва “адіабатичне розширення” також адекватна, оскільки означає відсутність квантових переходів між різними атомними станами.

У другому підході збурення розглядають як окремі зіткнення атома з навколишніми частинками. Такий механізм розширення спектральних ліній називають ударним механізмом. Він урахує збурення легкими частинками, наприклад, електронами. Їхні теплові швидкості, внаслідок малої маси, на декілька порядків більші, ніж атомів. Крім того, ударний механізм урахує, що збурюючі частинки розподілені за швидкостями і у хвості цього розподілу також є частинки з великими швидкостями. При такому механізмі можливі і квантові переходи атома з одного стану в інший, тобто збурення може бути й неадіабатичним.

Нашим завданням є побудува теорії обох розглянутих механізмів розширення спектральних ліній атомів. Насправді ці механізми потрібно врахувати одночасно, так щоб перевага одному або іншому надавалась лише грою параметрів в остаточних виразах для коефіцієнта поглинання.

§ 17. Розширення спектральних ліній атома зарядженими частинками

Якщо атом, що поглинає або випромінює фотони, оточений зарядженими частинками (електрони, йони), то в полі, яке вони створюють, відбувається розщеплення енергетичних рівнів атома — ефект Штарка. Це розщеплення тим більше, чим сильніше поле. Найближче оточення атомів, унаслідок флюктуацій густини частинок, є неоднорідним. Тому величина такого електричного мікрополя характеризується певним розподілом. Це своєю чергою приводить до додаткового розширення спектральних ліній атома в зоряній атмосфері. Отже, для розрахунку характеру цього розширення перед нами постає задача про розподіл імовірностей напруженості електричного поля в плазмі.

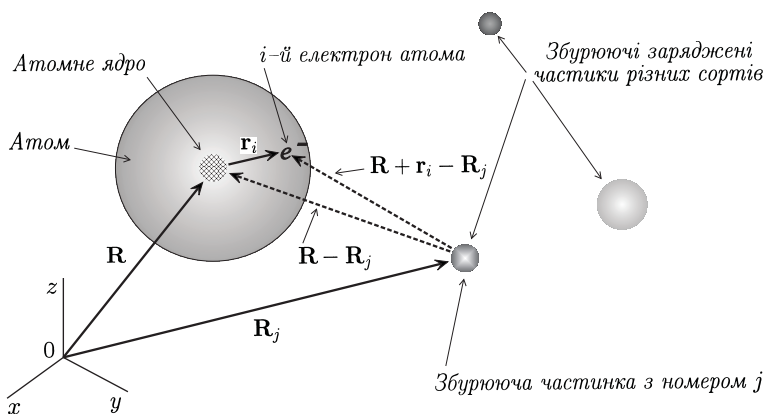


Рис. 11. Атом, що поглинає або випромінює світло, в оточенні збурюючих частинок у плазмі зоряної атмосфери.

Позначимо координату центра мас виділеного атома, що відповідає за висвічування певної спектральної лінії, через \mathbf{R} (див. рис. 11). Під атомом тут будемо розуміти нейтральний атом або йон із зарядом $Z|e|$. Ядро й електрони атома взаємодіють з навколишніми частинками, кожна з яких має координату \mathbf{R}_j і несе заряд $|e|Z_j$, $j = 1, 2, \dots, N_p$, N_p — число частинок середовища. Ці частинки — йонізовані атоми та вільні електрони. Величина Z_j може набувати як додатних, так і від'ємних значень, зокрема для електрона $Z_j = -1$. Запишемо ту частину енергії цієї взаємодії, яка зумовлена кулонівськими силами:

$$U = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_0 Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} - \sum_{i=1}^{Z_e} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_j}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}. \quad (17.1)$$

Тут перший доданок зображує взаємодію заряджених частинок плазми з ядром атома, заряд якого дорівнює $|e|Z_0$. Другий доданок — це енергія взаємодії електронів атома, кількість яких дорівнює Z_e , з оточуючими зарядами, \mathbf{r}_i — координата i -го електрона відносно ядра \mathbf{R} . Для нейтрального атома очевидно, що $Z_0 = Z_e$.

Використовуючи оператор зсуву координати \mathbf{R} , запишемо енергію U так⁶:

$$U = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_0 Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} - \sum_{i=1}^{Z_e} \sum_{j=1}^{N_p} e^{\mathbf{r}_i \nabla} \frac{e^2 Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}, \quad (17.2)$$

де ∇ — це оператор градієнта, що діє на радіус-вектор ядра атома \mathbf{R} . Розкладаємо експоненту в (17.2) в ряд:

$$U = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_0 Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} - \sum_{i=1}^{Z_e} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} - \left(\sum_{i=1}^{Z_e} \mathbf{r}_i \right) \nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} + \dots \quad (17.3)$$

⁶ див. виноску на стор. 100.

Перший член розкладу експоненти об'єднуємо з першим доданком і отримуємо енергію кулонівської взаємодії навколишніх зарядів з атомом, тобто йоном, що має заряд $Z = Z_0 - Z_e$. Для нейтрального атома кількість електронів $Z_e = Z_0$ і повний заряд $Z = 0$. Другий член розкладу експоненти дає енергію взаємодії дипольного моменту атома

$$\mathbf{d} = e \sum_{i=1}^{Z_e} \mathbf{r}_i = -|e| \sum_{i=1}^{Z_e} \mathbf{r}_i \quad (17.4)$$

з електричним полем напруженості

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}, \quad (17.5)$$

яке створюють частинки оточення в точці розташування атома \mathbf{R} . Отже,

$$U = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{e^2 Z Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} - \mathbf{d} \boldsymbol{\mathcal{E}} + \dots \quad (17.6)$$

Опущені в цьому розкладі доданки, позначені крапками, описують взаємодію квадрупольного моменту атома з градієнтом електричного поля оточення та вищі мультипольні взаємодії. Надалі ми не розглядатимемо їх, а зосередимо увагу лише на взаємодії дипольного моменту атома з електричним полем, яка і спричинює ефект Штарка, тобто дає залежність рівнів енергії атома від величини напруженості поля: $E_a = E_a(\mathcal{E})$.

Спочатку ми розглянемо розширення спектральної лінії важкими частинками, тобто йонами, коли можна застосовувати квазістатичне наближення, яке ми обговорювали в попередньому параграфі. Розширення електронами внаслідок того, що вони є легкими частинками, потрібно брати до уваги в рамках ударного наближення. Урахування спільної дії електронів та йонів повинно проводитись так. Насамперед урахуємо розширення електронами, тобто візьмемо до уваги швидкі рухи, а потім — розширення

важкими повільними частинками, електричне поле яких у точці знаходження виділеного атома змінюється повільно, так що до йонів можна застосовувати квазістатичне наближення. Ударне наближення, як ми побачимо пізніше, дає лоренцівський контур спектральної лінії. Тому для відшукування результуючого контуру залишається обчислити розширення лінії важкими зарядженими частинками.

Використаймо тотожність:

$$\int d\boldsymbol{\mathcal{E}} \delta\left(\boldsymbol{\mathcal{E}} + \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}\right) = 1 \quad (17.7)$$

і запишімо загальний вираз (12.6) для коефіцієнта поглинання так:

$$\begin{aligned} \kappa(q) = & \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{AA'} \int d\boldsymbol{\mathcal{E}} \delta\left(\boldsymbol{\mathcal{E}} + \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}\right) \\ & \times \rho_A f_{A'A}(q) \frac{\gamma_{A'A}/2\pi}{(\omega_{A'A} + \Delta\omega_{A'A} - \omega)^2 + (\gamma_{A'A}/2)^2}. \end{aligned} \quad (17.8)$$

Інтегрування в (17.7) відбувається в безмежних межах за кожною з компонент вектора $\boldsymbol{\mathcal{E}}$, який має зміст напруженості електричного поля. Дельта-функція з усіх можливих значень вектора $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ залишає в (17.8) лише ті, які реалізуються згідно з означенням (17.5).

Із суми “за частинками” у (12.6), як і при розгляді ефекту Доплера в § 13, ми залишили в (17.8) для спрощення запису один сорт атомів, кількість яких дорівнює N . Повний гамільтоніан нашої системи “атом плюс збурюючі частинки” дорівнює сумі гамільтоніана атома в полі $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ (тобто з урахуванням другого доданка енергії U в (17.6)) та гамільтоніана збурюючих частинок, який бере до уваги також енергію їх кулонівської взаємодії з виділеним атомом (перший доданок у формулі (17.6)) та короткосяжну взаємодію, яку ми не виписували. Відповідно до цього статистичний оператор ρ_A — це добуток статистичного оператора

ρ_a атома в полі \mathcal{E} на статистичний оператор системи збурюючих частинок, що взаємодіють між собою та з виділеним атомом (йоном) через кулонівські сили й короткосяжні сили квантовомеханічної природи. Уважаємо, що система збурюючих частинок як ціле не змінює свого стану, коли атом поглинає або випромінює фотони. Тому в наборах квантових чисел станів $|A\rangle$ та $|A'\rangle$ її квантові числа є однаковими. Отже, підсумовування за цими квантовими числами у виразі (17.8) для $\varkappa(q)$ разом зі статистичним оператором системи збурюючих частинок є нічим іншим, як усередненням за станами цієї системи. При цьому ми приймаємо, що рух заряджених частинок, які збурюють атом, підкорений законам класичної механіки. Це справді так, оскільки параметр квантовості, тобто довжина теплової хвилі де Бройля частинки $\lambda = (2\pi\hbar^2/MT)^{1/2}$, M — її маса, віднесена до середньої відстані між частинками, унаслідок високої температури й розрідженості атмосфери зорі, є дуже малою величиною. Тому усереднення за станами заряджених частинок зводимо, згідно з принципами класичної статистичної механіки, до інтегрування за їхніми координатами $\{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_{N_p}\}$ з функцією розподілу, яка дорівнює больцманівському факторові (поділеному на відповідний конфігураційний інтеграл) з потенціальною енергією міжчастинкової взаємодії Φ , що включає поряд з енергією кулонівської взаємодії також енергію короткосяжних взаємодій, яка враховує наявність розмірів частинок та притягувальну взаємодію типу ван-дер-ваальсівської. Тобто мова йде про конфігураційне усереднення, яке ми скорочено позначимо кутовими дужками:

$$\langle \dots \rangle = \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi/T}(\dots) / \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi/T}. \quad (17.9)$$

Після цих роз'яснень і зауважень виконуємо в (17.8) усі дії, які привели нас до виразу (13.18). Тобто враховуємо в $\varkappa(q)$ радіаційне загасання квантовомеханічних станів атома та ефект Доплера і в результаті знаходимо:

$$\varkappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \int d\mathcal{E} W(\mathcal{E}) \rho_a f_{a'a} \frac{H(\alpha, v')}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}}, \quad (17.10)$$

де ми ввели функцію розподілу мікрополя⁷

$$W(\mathcal{E}) = \left\langle \delta \left(\boldsymbol{\varepsilon} + \sum_{j=1}^{N_p} |e| Z_j \nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right) \right\rangle. \quad (17.11)$$

З фізичних міркувань очевидно, що функція $W(\mathcal{E})$ залежить лише від величини напруженості \mathcal{E} , а не від напрямку, оскільки в системі немає виділеного напрямку. Квантові числа a, a' у формулі (17.10) містять у собі квантові числа, що нумерують штарківські компоненти зсуву та розщеплення енергетичних рівнів, а параметр v' у функції Фойґта залежить від величини \mathcal{E} напруженості електричного поля:

$$v' = \frac{\omega - \omega_{a'a}}{\Delta\omega_D} = \frac{\omega - [E_{a'}(\mathcal{E}) - E_a(\mathcal{E})] / \hbar}{\Delta\omega_D}. \quad (17.12)$$

Як відомо, в атомі водню спостерігаємо лінійний ефект Штарка внаслідок виродження квантових станів за орбітальним квантовим числом [8, 13]. У цьому випадку різниця енергій

$$E_{a'}(\mathcal{E}) - E_a(\mathcal{E}) = \hbar\omega_0 + \alpha_{aa'}\mathcal{E}, \quad (17.13)$$

де $\alpha_{aa'}$ — різниця між середніми значеннями дипольного моменту атома в станах $|a\rangle$ та $|a'\rangle$. В інших атомах є квадратичний ефект Штарка, тобто квадратична залежність енергії від напруженості поля \mathcal{E} [13]:

$$E_{a'}(\mathcal{E}) - E_a(\mathcal{E}) = \hbar\omega_0 + \frac{\beta_{aa'}}{2}\mathcal{E}^2, \quad (17.14)$$

де $\beta_{aa'}$ — різниця між поляризованостями атома в станах $|a\rangle$ та $|a'\rangle$.

⁷ При обчисленнях, що привели до формули (17.10), ми вже проінтегрували за координатами центра мас атома, тому у виразі (17.11) наявність змінної \mathbf{R} є фактично зайвою: функція $W(\mathcal{E})$ не залежить від \mathbf{R} унаслідок просторової однорідності системи. Ми могли сісти на центр мас атома, поклавши $\mathbf{R} = 0$ і відрахувувати координати частинок R_1, \dots, R_{N_p} від нього. Зручно, однак, для наочності систему відліку повернути на старе місце, де положення атома визначається радіус-вектором \mathbf{R} .

Перш ніж рухатись далі, зробимо декілька зауважень. По-перше, для отримання повного коефіцієнта поглинання в лінії вираз (17.10) необхідно підсумувати за усіма квантовими числами штарківських компонент з наборів a та a' нижнього й верхнього рівнів. По-друге, сили осцилятора $f_{a'a}$, як і статистичний оператор ρ_a , залежать від напруженості поля \mathcal{E} . Однак ця залежність незначна, оскільки поля збудовуючих частинок, характерна величина яких

$$\mathcal{E}_0 \sim e^2 \left(\frac{N_p}{V} \right)^{2/3},$$

слабкі порівняно з внутрішніми полями атома, тому що середні відстані між частинками в атмосфері зорі є чималими порівняно з атомними розмірами. Отже, матричні елементи, що входять в означення сил осциляторів, достатньо розраховувати на відповідних лінійних комбінаціях хвильових функцій незбудованого атома. З тієї ж причини не беремо до уваги залежності від \mathcal{E} і сталої загасання γ . Тому ми зосередимо увагу на найчутливішій залежності від мікрополя, тобто на залежності параметра v' від \mathcal{E} , яка і спричинює ефект розширення спектральних ліній. Таким чином,

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^{3/2} e^2 N}{mc\Delta\omega_D V} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \sum \rho_a f_{a'a} P(s, \alpha, v), \quad (17.15)$$

за усіма штарківськими компонентами верхнього та нижнього рівнів

де функція

$$P(s, \alpha, v) = \int d\mathcal{E} W(\mathcal{E}) H(\alpha, v'), \quad (17.16)$$

для лінійного ефекту Штарка параметр

$$s = |\alpha_{aa'}| \mathcal{E}_0 / \hbar \Delta\omega_D, \quad (17.17)$$

а для квадратичного —

$$s = \frac{\beta_{aa'}}{2} \mathcal{E}_0^2 / \hbar \Delta\omega_D. \quad (17.18)$$

Величина s є відношенням характерної частоти штарківського розщеплення до доплерівської частоти. Пізніше величину \mathcal{E}_0 , що є характерним масштабом для електричного поля в плазмі, ми уточнимо. Очевидно, що

$$P(0, \alpha, v) = H(\alpha, v), \quad (17.19)$$

оскільки при цьому $v' = v$, а

$$\int W(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = 1. \quad (17.20)$$

Для обчислення явного вигляду функції $P(s, \alpha, v)$ потрібно, насамперед, розрахувати функцію розподілу мікрополів $W(\mathcal{E})$, після цього знайти її згортку (17.16) з функцією Фойгта.

§ 18. Функція розподілу мікрополів

Виходимо з означення (17.11) функції розподілу мікрополів $W(\mathcal{E})$ і розкладемо її в ряд Фур'є:

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} W_q e^{i\mathbf{q}\mathcal{E}}, \quad (18.1)$$

$$W_q = \int d\mathcal{E} W(\mathcal{E}) e^{-i\mathbf{q}\mathcal{E}}. \quad (18.2)$$

Після підстановки виразу (17.11) у (18.2) отримуємо

$$W_q = \left\langle \exp \left(i\mathbf{q} \nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right) \right\rangle. \quad (18.3)$$

Зупинимось на обчисленні цієї величини. Зрозуміло, що точний її розрахунок неможливий. Отже, потрібно розвивати наближені методи. Можна розглянути звичайну теорію збурень, наприклад, з розкладом W_q за степенями \mathbf{q} з наступним частковим підсумовуванням отриманого ряду. Це ми зробимо в кінці

цього параграфу. А зараз розвинемо хитріший підхід, який дасть змогу витягти неаналітичність у залежності функції W_q від змінної q .

Обчислимо градієнт функцій W_q за змінною \mathbf{q} і спроектуємо його на вектор \mathbf{q} , іншими словами, подіємо на W_q оператором $\mathbf{q}\nabla_{\mathbf{q}}$. Оскільки функція $W(\mathcal{E})$ залежить лише від модуля вектора напруженості \mathcal{E} , то й коефіцієнт Фур'є W_q також залежить від модуля вектора \mathbf{q} , що легко показати, інтегруючи за кутами в (18.2). Тому

$$\mathbf{q}\nabla_{\mathbf{q}}W_q = \mathbf{q}\frac{\mathbf{q}}{q}\frac{dW_q}{dq} = q\frac{dW_q}{dq}$$

і з (18.3) маємо

$$q\frac{dW_q}{dq} = \left\langle \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right) \exp \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right) \right\rangle. \quad (18.4)$$

Виконаймо в правій частині цього виразу декілька елементарних вправ на рівні перепозначень і без будь-яких коментарів, використовуючи лише означення середнього (17.9) та функції W_q з (18.3):

$$\begin{aligned} q\frac{dW_q}{dq} &= \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi/T} \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right) \\ &\times \exp \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right) \Bigg/ \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi/T} \\ &= \frac{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi/T} \exp \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right)}{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi/T}} \end{aligned} \quad (18.5)$$

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right) \exp \left(-\frac{\Phi}{T} + i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right) \\ & \times \frac{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} \exp \left(-\frac{\Phi}{T} + i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right)}{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} \exp \left(-\frac{\Phi}{T} + i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right)} \\ & = \left\langle \exp \left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right) \right\rangle \overline{\left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right)}. \end{aligned}$$

Як бачимо, перший множник дорівнює W_q , а рискою над другим множителем позначено своєрідне конфігураційне середнє, яке обчислюємо з больцманівським фактором, де потенціальна енергія Φ замінена на

$$\Phi' = \Phi - T i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|}. \quad (18.6)$$

Формально другий доданок у цьому виразі можна трактувати як додаткову взаємодію виділеного атома, що має фіктивний дипольний момент величини $\mathbf{d} = -i\mathbf{q}T$, з електричним полем оточення. Отже, за означенням, середнє

$$\overline{(\dots)} = \frac{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi'/T} (\dots)}{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi'/T}}. \quad (18.7)$$

Отримано важливий результат: ми знайшли для функції W_q диференціальне рівняння

$$q \frac{dW_q}{dq} = W_q \overline{\left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right)}, \quad (18.8)$$

з “початковою” умовою $W_{q=0} = 1$, яка впливає з означення (18.3). Розв’язок цього рівняння такий:

$$W_q = \exp \left[\int_0^q \frac{dq}{q} \overline{\left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_j|} \right)} \right]. \quad (18.9)$$

Перейдімо до обчислення позначеного рискою середнього в цьому виразі. Больцманівський фактор з енергією Φ' залежить від змінних \mathbf{R} та $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}$, а інтегрування в означенні нашого середнього відбувається за всіма координатами частинок середовища, тому

$$\overline{\left(i\mathbf{q} \nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right)} = i\mathbf{q} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{V} \int d\mathbf{R}_j F_2^j(\mathbf{R}, \mathbf{R}_j) \times \nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}. \quad (18.10)$$

Тут величина

$$F_2^j(\mathbf{R}, \mathbf{R}_j) = V \frac{\int' d\mathbf{R}_1 \dots \int' d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi'/T}}{\int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_{N_p} e^{-\Phi'/T}}, \quad (18.11)$$

де штрихи біля знака інтеграла в чисельнику означають, що інтегрування за \mathbf{R}_j відсутнє, за своїм змістом є парною функцією розподілу, яка дорівнює густині ймовірності взаємного розташування виділеного атома із зарядом $|e|Z$ і фіктивним дипольним моментом $\mathbf{d} = -iT\mathbf{q}$ та j -тої збудженої частинки при довільному розташуванні всіх інших частинок. Вона задовольняє умову нормування

$$\frac{1}{V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}_j F_2^j(\mathbf{R}, \mathbf{R}_j) = 1. \quad (18.12)$$

Зауважимо, що формально, згідно з означенням, у вираз (18.11) потрібно було б додати в знаменнику ще один інтеграл за змінною \mathbf{R} , а в чисельнику має бути множник V^2 . Однак, унаслідок просторової однорідності системи, знаменник у (18.11) не залежатиме від \mathbf{R} й інтегрування за цією змінною дає об'єм системи V (див. виноску на стор. 114). У результаті ми приходимо до виразу (18.11).

Використаймо тепер властивість парної функції розподілу, яка впливає з просторової однорідності системи, а саме те, що вона залежить лише від різниці координат:

$$F_2^j(\mathbf{R}, \mathbf{R}_j) = F_2^j(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j). \quad (18.13)$$

Відтак перейдімо у виразі (18.10) до нової змінної інтегрування $\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \mathbf{R}_j$ (якобіан переходу дорівнює одиниці), попередньо обчисливши потрібний градієнт, а підсумовування за частинками зведемо до підсумовування за сортами частинок:

$$\overline{\left(i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right)} = -i \sum_{c \geq 1} \frac{|e|Z_c N_c}{V} \int \frac{\mathbf{q}\mathbf{R}}{R^3} F_2^c(\mathbf{R}) d\mathbf{R}. \quad (18.14)$$

Штрих зі змінної інтегрування для простоти запису знято. Індексом c нумеруємо сорти частинок, N_c — число частинок сорту c , причому очевидно, що сума всіх частинок повинна дорівнювати N_p :

$$\sum_{c \geq 1} N_c = N_p.$$

Використовуючи тепер вираз (18.14), запишемо функцію W_q з (18.9) так:

$$W_q = e^{-\chi_q}, \quad (18.15)$$

$$\chi_q = \int_0^q \frac{dq}{q} \sum_{c \geq 1} \frac{|e|Z_c N_c}{V} \int \frac{i\mathbf{q}\mathbf{R}}{R^3} F_2^c(\mathbf{R}) d\mathbf{R}. \quad (18.16)$$

Функція розподілу мікрополів (18.1) набуває такого вигляду:

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathcal{E} - \chi_q}. \quad (18.17)$$

Отримані вирази (18.15)–(18.17) є остаточними. Вони мають загальний характер і працюють для класичної плазми будь-якої

концентрації та для довільних температур. Уся ця інформація закладена в парну функцію розподілу $F_2^c(\mathbf{R})$. Залежно від того, наскільки точно вона відома, настільки точно ми будемо знати функцію розподілу мікрополів.

При описі зоряних атмосфер, унаслідок достатньо низької концентрації частинок, для функції розподілу можна використати добре відоме з теорії класичної плазми “газове наближення” [20]. У цьому наближенні функція $F_2^c(\mathbf{R})$ зображується больцманівським фактором із потенціалом, який дорівнює сумі короткосяжного потенціалу⁸ взаємодії виділеного атома із частинкою оточення c -сорту $\Phi_c^{\text{SR}}(R)$ та екранованого потенціалу Дебая, узагальненого на наявність у виділеному атомі, згідно з (18.6), фіктивного дипольного моменту $\mathbf{d} = -iT\mathbf{q}$:

$$F_2^c(\mathbf{R}) = \exp \left[-\frac{\Phi_c^{\text{SR}}(R)}{T} - \frac{|e|Z_c}{T} \hat{Q} \frac{e^{-\varkappa_D R}}{R} \right], \quad (18.18)$$

де узагальнений заряд атома

$$\hat{Q} = |e|Z - iT(\mathbf{q}\nabla), \quad (18.19)$$

а обернений дебаївський радіус екранування

$$\varkappa_D = \left(\sum_{c \geq 1} \frac{4\pi e^2 Z_c^2 N_c}{TV} \right)^{1/2}. \quad (18.20)$$

Підставмо вираз (18.18) у (18.16):

$$\begin{aligned} \chi_q = & \int_0^q \frac{dq}{q} \sum_{c \geq 0} \frac{|e|Z_c N_c}{V} \int d\mathbf{R} \frac{i\mathbf{q}\mathbf{R}}{R^3} \exp \left[-\frac{\Phi_c^{\text{SR}}(R)}{T} \right. \\ & \left. - \frac{e^2 Z Z_c}{TR} e^{-\varkappa_D R} - i \frac{|e|Z_c(\mathbf{q}\mathbf{R})}{R^3} (1 + \varkappa_D R) e^{-\varkappa_D R} \right]. \quad (18.21) \end{aligned}$$

⁸З метою скорочення користуємось тут не зовсім точною, але широковживаною назвою “потенціал” для позначення потенціальної енергії взаємодії, що не повинно викликати непорозумінь. Абревіатура “SR” біля потенціалу походить від перших літер англійських слів short range — короткосяжний.

Виконаймо деякі перетворення в цьому виразі і зведемо його до однократного інтеграла.

Отже, в інтегралі за \mathbf{R} переходимо до сферичної системи координат, вибираючи вісь z уздовж вектора \mathbf{q} . Після цього інтегруємо за азимутальним кутом φ , далі виникає можливість взяти інтеграл спочатку за q , а потім за $x = \cos \vartheta$, де кут $\vartheta = \widehat{\mathbf{qR}}$:

$$\begin{aligned}
 \chi_q &= i \sum_{c \geq 1} \frac{|e|Z_c N_c}{V} 2\pi \int_0^\infty dR \\
 &\times \exp \left[-\Phi_c^{\text{SR}}(R)/T - e^2 Z Z_c e^{-\kappa_{\text{D}} R} / RT \right] \int_{-1}^1 x dx \int_0^q dq \\
 &\times \exp \left[-i \frac{|e|Z_c q x}{R^2} (1 + \kappa_{\text{D}} R) e^{-\kappa_{\text{D}} R} \right] \\
 &= - \sum_{c \geq 1} \frac{2\pi N_c}{V} \int_0^\infty dR \frac{R^2}{(1 + \kappa_{\text{D}} R) e^{-\kappa_{\text{D}} R}} \\
 &\times \exp \left[-\Phi_c^{\text{SR}}(R)/T - e^2 Z Z_c e^{-\kappa_{\text{D}} R} / RT \right] \\
 &\times \int_{-1}^1 dx \left\{ \exp \left[-i \frac{q|e|Z_c}{R^2} x (1 + \kappa_{\text{D}} R) e^{-\kappa_{\text{D}} R} \right] - 1 \right\}
 \end{aligned}$$

і остаточно

$$\begin{aligned}
 \chi_q &= \sum_{c \geq 1} \frac{4\pi N_c}{V} \int_0^\infty dR \frac{R^2}{(1 + \kappa_{\text{D}} R) e^{-\kappa_{\text{D}} R}} \\
 &\times \exp \left[-\Phi_c^{\text{SR}}(R)/T - e^2 Z Z_c e^{-\kappa_{\text{D}} R} / RT \right] \quad (18.22) \\
 &\times \left\{ 1 - \frac{\sin \left(q|e|Z_c (1 + \kappa_{\text{D}} R) e^{-\kappa_{\text{D}} R} / R^2 \right)}{q|e|Z_c (1 + \kappa_{\text{D}} R) e^{-\kappa_{\text{D}} R} / R^2} \right\}.
 \end{aligned}$$

Якщо задати короткосяжний потенціал $\Phi_c^{\text{SR}}(R)$, наприклад, як потенціал Ленарда–Джонса або ще простішим потенціалом твердих сфер, то вираз (18.22) легко піддається обчисленню на комп'ютері.

Як ми і планували, запропонуємо тепер простішу теорію збудень для функції W_q . Повернімось знову до означення (18.3), яке запишемо так:

$$W_q = \langle e^A \rangle, \quad (18.23)$$

де

$$A = i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e|Z_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}. \quad (18.24)$$

Використаймо поняття незвідних середніх і запишімо (18.23) у вигляді експоненти від степеневого ряду за \mathbf{q} :

$$W_q = \langle e^A \rangle = \exp \left(\sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} A^{[n]} \right), \quad (18.25)$$

де незвідні середні⁹

$$\begin{aligned} A^{[1]} &= \langle A \rangle, \\ A^{[2]} &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \\ A^{[3]} &= \langle A^3 \rangle - 3\langle A^2 \rangle \langle A \rangle + 2\langle A \rangle^2, \\ A^{[4]} &= \langle A^4 \rangle - 4\langle A^3 \rangle \langle A \rangle - 3\langle A^2 \rangle \langle A^2 \rangle + 12\langle A^2 \rangle \langle A \rangle^2 - 6\langle A \rangle^4, \\ &\dots \end{aligned} \quad (18.26)$$

Обмежимося двома членами ряду в (18.25), обґрунтовуючи це незначною міжчастинковою кореляцією в такій розрідженій

⁹Величини $A^{[n]}$ називають також семінваріантами або кумулянтами порядку n .

системі, якою є зоряна атмосфера. Якщо так, то середнє $\langle A^n \rangle$ для $n \geq 3$ розпадається на добуток середніх і, очевидно, незвідне середнє $A^{[n]}$ дорівнюватиме нулеві. Отже, беремо до уваги лише $A^{[1]}$ та $A^{[2]}$.

Перше незвідне середнє

$$\begin{aligned} A^{[1]} &= \langle A \rangle = i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \left\langle \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right\rangle \\ &= i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}_j F_2^j(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}, \end{aligned} \quad (18.27)$$

де $F_2^j(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|)$ — парна функція розподілу, розрахована з потенціалом Φ . Переходимо до нової змінної, $\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \mathbf{R}_j$ замість \mathbf{R} , і знаходимо (інтегрування за \mathbf{R}'_j дає об'єм системи V):

$$A^{[1]} = i\mathbf{q}\nabla \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \frac{1}{V} \int d\mathbf{R}' \frac{F_2^j(R')}{R'} = 0, \quad (18.28)$$

оскільки градієнт від сталої величини дорівнює нулеві. Можна дійти цього результату і так:

$$\begin{aligned} A^{[1]} &= i \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \left\langle \mathbf{q}\nabla \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|} \right\rangle \\ &= -i \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \left\langle \frac{\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^3} \right\rangle \\ &= -i \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}_j \frac{\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^3} F_2^j(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|) \\ &= -i \sum_{j=1}^{N_p} |e|Z_j \frac{1}{V} \int d\mathbf{R}' \frac{\mathbf{q}\mathbf{R}'}{R'^3} F_2^j(R') \end{aligned} \quad (18.29)$$

$$= -iq \sum_{j=1}^{N_p} |e| Z_j \frac{1}{V} 2\pi \int_0^{\infty} dR' F_2^j(R') \int_0^{\pi} \sin \theta \cos \theta d\theta = 0,$$

ми перейшли до сферичних координат R', θ, φ . Нуль отримуємо внаслідок інтегрування за полярним кутом $\theta = \widehat{\mathbf{R}\mathbf{q}}$.

Тепер величина

$$\begin{aligned} A^{[2]} = \langle A^2 \rangle &= - \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} e^2 Z_i Z_j \\ &\times \left\langle \frac{\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i) \mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_i|^3 |\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^3} \right\rangle \\ &= - \sum_{j=1}^{N_p} e^2 Z_j^2 \left\langle \frac{[\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)]^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^6} \right\rangle \\ &- \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} e^2 Z_i Z_j \left\langle \frac{\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i) \mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_i|^3 |\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^3} \right\rangle \\ &= - \sum_{j=1}^{N_p} e^2 Z_j^2 \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}_j \frac{(\mathbf{q}, \mathbf{R} - \mathbf{R}_j)^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^6} F_2^i(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|) \\ &- \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} e^2 Z_i Z_j \frac{1}{V^3} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}_i \int d\mathbf{R}_j \\ &\times \frac{\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i) \mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_i|^3 |\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|^3} F_3^{ij}(\mathbf{R}, \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j), \end{aligned} \quad (18.30)$$

для скалярного добутку тут використано також таке позначення:

$$(\mathbf{q}, \mathbf{R} - \mathbf{R}_j) = \mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j).$$

Тричастинкова функція розподілу $F_3^{ij}(\mathbf{R}, \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)$, яка входить в останній доданок, якщо не враховувати кореляцію між i -тою та j -тою частинками, дорівнює добуткові $F_2^i(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_i|)F_2^j(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|)$. Тому інтегрування за \mathbf{R}_i та \mathbf{R}_j відбувається незалежно і дає, як і у виразі (18.29) для $\langle A \rangle$, нульовий результат. Отже, залишається лише перший доданок у (18.30):

$$A^{[2]} = - \sum_{c \geq 1} e^2 Z_c^2 \frac{N_c}{V} \int d\mathbf{R} \frac{(\mathbf{q}\mathbf{R})^2}{R^6} F_2^c(R), \quad (18.31)$$

від підсумовування за частинками ми перейшли до підсумовування за сортами частинок, як і у (18.14).

Знову переходимо тут до сферичних координат, вибираючи вісь z уздовж вектора \mathbf{q} : інтеграл за азимутальним кутом φ дає 2π , а інтеграл за широтним кутом $\theta = \widehat{\mathbf{q}\mathbf{R}}$ дорівнює $2/3$. Тому вираз (18.31) можна записати так:

$$A^{[2]} = -q^2 \bar{\mathcal{E}}^2, \quad (18.32)$$

де ми ввели характерний масштаб вимірювання напруженості електричного поля $\bar{\mathcal{E}}$:

$$\bar{\mathcal{E}}^2 = \sum_{c \geq e^2} Z_c^2 \frac{4\pi N_c}{3V} \int_0^\infty dR \frac{F_2^c(R)}{R^2}. \quad (18.33)$$

Цей інтеграл існує, оскільки парна функція дорівнює нулеві, якщо відстані між частинками менші від їхніх розмірів, а на великих відстанях $F_2^c(R)$ прямує до одиниці. Тому, очевидно, інтеграл є обернено пропорційним до середньої відстані $\langle r \rangle$ між частинками сорту c , яку своєю чергою визначимо з рівняння

$$\frac{4}{3} \pi \langle r \rangle^3 = \frac{V}{N_c}.$$

Отже, покладаємо

$$\bar{\mathcal{E}}^2 = \text{const} \sum_{c \geq 1} e^2 Z_c^2 \left(\frac{4\pi N_c}{3V} \right)^{4/3}, \quad (18.34)$$

де ми сподіваємось, що стала величина const повинна бути порядку одиниці. Насправді, const мусить виявляти незначну залежність від розмірів частинок та густини.

Тепер з означення (18.1) за допомогою (18.25) та (18.28), (18.32) знаходимо

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{-q^2 \mathcal{E}^2/2 + i\mathbf{q}\mathcal{E}}. \quad (18.35)$$

Цей трикратний інтеграл розбивається на добуток трьох, кожен з яких легко беремо за формулою, яка наведена у виносці на стор. 84:

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \mathcal{E}^3} e^{-\mathcal{E}^2/2\mathcal{E}^2}. \quad (18.36)$$

У наступному параграфі ми порівняємо цей вираз з тим, що дає формула (18.17).

§ 19. Розподіл Гольцмарка

Для детальнішого аналізу отриманих у попередньому параграфі виразів обмежимося простим наближенням. А саме, знехтуємо розмірами частинок, $\Phi_c^{\text{SR}}(R) = 0$, а також екрануванням, $\kappa_D = 0$. Ці припущення справедливі, якщо атмосфера є достатньо розрідженою і середні відстані між частинками великі $Na^3/V < 1$ (a — “діаметр” частинок), а температура достатньо висока, $\kappa_D a < 1$. Нехай, крім того, виділений атом є нейтральним, тобто $Z = 0$. У результаті для функції χ_q з (18.22) знаходимо так зване наближення Гольцмарка [1, 6]:

$$\chi_q = \sum_{c \geq 1} \frac{4\pi N_c}{V} \int_0^\infty R^2 \left[1 - \frac{\sin(q|e|Z_c/R^2)}{q|e|Z_c/R^2} \right] dR. \quad (19.1)$$

Робимо заміну змінної інтегрування $t = q|e|Z_c/R^2$:

$$\chi_q = q^{3/2} \sum_{c \geq 1} \frac{2\pi N_c}{V} (|eZ_c|)^{3/2} \int_0^\infty t^{-5/2} \left(1 - \frac{\sin t}{t} \right) dt.$$

Отриманий інтеграл зводимо до табличного. Спочатку інтегруємо перший член у круглих дужках, далі тричі інтегруємо частинами член із синусом. Разом проінтегровані доданки на обох межах дають нульовий внесок, і в результаті:

$$\int_0^{\infty} t^{-5/2} \left(1 - \frac{\sin t}{t} \right) dt = \frac{8}{15} \int_0^{\infty} \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt = \frac{4}{15} \sqrt{2\pi}.$$

Тепер остаточно функція

$$\chi_q = (q\mathcal{E}_0)^{3/2}, \quad (19.2)$$

де характерний масштаб напруженості електричного поля

$$\mathcal{E}_0 = 2\pi \left(\frac{4}{15} \right)^{2/3} \left(\sum_{c \geq 1} \frac{N_c}{V} |eZ_c|^{3/2} \right)^{2/3}. \quad (19.3)$$

Саме про цю величину йшла мова у формулах (17.17), (17.18).

Повернімось до функції $W(\mathcal{E})$. Оскільки χ_q залежить лише від модуля вектора \mathbf{q} , то в (18.1) можна перейти до інтегрування у сферичних координатах і проінтегрувати за кутами:

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{2\pi^2 \mathcal{E}} \int_0^{\infty} q \sin(q\mathcal{E}) e^{-\chi_q} dq. \quad (19.4)$$

Пригадаймо також, що густина розподілу мікрополів за абсолютним значенням напруженості поля \mathcal{E} , як впливає з умови нормування (17.20) для функції $W(\mathcal{E})$, дорівнює

$$w(\mathcal{E}) = 4\pi \mathcal{E}^2 W(\mathcal{E}), \quad (19.5)$$

$$\int_0^{\infty} w(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = 1.$$

Для наближення Гольцмарка (19.1) розкладом синуса в ряд під інтегралом легко знаходимо поведінку функції розподілу мікрополів при малих значеннях \mathcal{E} , попередньо зробивши заміну змінних $(q\mathcal{E}_0)^{3/2} = x$ і скориставшись означенням Γ -функції:

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{3\pi^2\mathcal{E}_0^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{(2n+1)!} \Gamma\left(2 + \frac{4}{3}n\right) \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0}\right)^{2n}. \quad (19.6)$$

Деякі перших членів ряду дають

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{3\pi^2\mathcal{E}_0^3} \left[1 - 0.4630 \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0}\right)^2 + 0.1226 \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0}\right)^4 + \dots \right]. \quad (19.7)$$

Знайдемо тепер асимптотику функції $W(\mathcal{E})$ при $\mathcal{E} \rightarrow \infty$. Виходимо з виразу (19.4):

$$\begin{aligned} W(\mathcal{E}) &= \frac{1}{2\pi^2\mathcal{E}} \left(-\frac{d}{d\mathcal{E}}\right) \int_0^{\infty} \cos(q\mathcal{E}) e^{(q\mathcal{E}_0)^{3/2}} dq \quad (19.8) \\ &= \frac{1}{2\pi^2\mathcal{E}} \left(-\frac{d}{d\mathcal{E}}\right) \frac{1}{\mathcal{E}} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{ix} \exp\left[-\left(x\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right)^{3/2}\right] dx \\ &= \frac{1}{2\pi^2\mathcal{E}} \left(-\frac{d}{d\mathcal{E}}\right) \frac{1}{\mathcal{E}} \operatorname{Re} \lim_{\nu \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-sx} \exp\left[-\left(x\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right)^{3/2}\right] dx, \end{aligned}$$

де $s = \nu - i$, а ν — дійсна величина. Далі розкладаємо експоненту в ряд за малим параметром $(\mathcal{E}_0/\mathcal{E})^{3/2}$, використовуємо означення Γ -функції, виділяємо дійсну частину і беремо похідну за \mathcal{E} :

$$\begin{aligned} W(\mathcal{E}) &= \frac{1}{2\pi^2\mathcal{E}} \left(-\frac{d}{d\mathcal{E}}\right) \frac{1}{\mathcal{E}} \lim_{\nu \rightarrow 0} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right)^{3n/2} \\ &\times \frac{1}{s^{3n/2+1}} \Gamma\left(\frac{3}{2}n + 1\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi^2 \mathcal{E}} \left(-\frac{d}{d\mathcal{E}} \right) \frac{1}{\mathcal{E}} \lim_{\nu \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} \right)^{3n/2} \\
&\times \frac{\Gamma(3n/2 + 1)}{(\nu^2 + 1)^{3n/4 + 1/2}} \cos[(3n/2 + 1)\delta] = \frac{1}{2\pi^2 \mathcal{E}^3} \lim_{\nu \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \\
&\times \frac{\Gamma(3n/2 + 2) \cos[(3n/2 + 1)\delta]}{(\nu^2 + 1)^{3n/4 + 1/2}} \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} \right)^{3n/2}, \quad (19.9)
\end{aligned}$$

де $\text{tg } \delta = 1/\nu$. Якщо $\nu \rightarrow 0$, то $\delta \rightarrow \pi/2$, і ми остаточно знаходимо:

$$\begin{aligned}
W(\mathcal{E}) &= \frac{1}{2\pi^2 \mathcal{E}^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n+1}}{n!} \\
&\times \sin\left(\frac{3\pi n}{4}\right) \Gamma\left(\frac{3n}{2} + 2\right) \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right)^{3n/2}. \quad (19.10)
\end{aligned}$$

Наш ряд виявився асимптотичним, оскільки $\Gamma(3n/2 + 2)$ зростає при $n \rightarrow \infty$ швидше, ніж $n!$. Ведучий член асимптотики $W(\mathcal{E})$, коли $n = 1$, є таким:

$$W(\mathcal{E}) = \frac{15}{16\pi\sqrt{2\pi}} \frac{\mathcal{E}_0^{3/2}}{\mathcal{E}^{9/2}}, \quad \mathcal{E} \rightarrow \infty. \quad (19.11)$$

На завершення параграфу наведемо графік функції Гольцмарка (рис. 12), розрахованої за формулою (19.5) з використанням (19.4), (19.2). Оскільки функція $w(\mathcal{E})$ має розмірність, обернену до \mathcal{E} , то вводимо знерозмірену функцію

$$\begin{aligned}
H(\mathcal{E}^*) &= \mathcal{E}_0 w(\mathcal{E}), \quad \mathcal{E}^* = \mathcal{E}/\mathcal{E}_0, \\
H(\mathcal{E}^*) &= \frac{2\mathcal{E}^*}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-x^{3/2}} x \sin(x\mathcal{E}^*) dx \\
&= \frac{2}{\pi\mathcal{E}^*} \int_0^{\infty} e^{-(y/\mathcal{E}^*)^{3/2}} y \sin y dy. \quad (19.12)
\end{aligned}$$

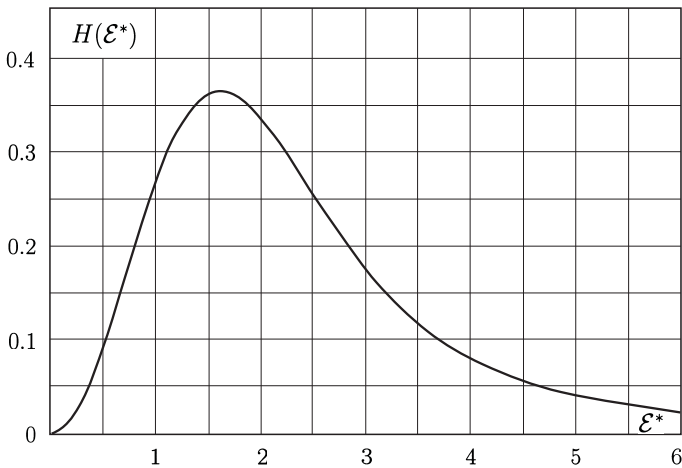


Рис. 12. Розподіл Гольцмарка.

Максимального значення 0.3663 функція $H(\mathcal{E}^*)$ досягає в точці $\mathcal{E}^* = 1.6077$.

Зауважимо, що функцію розподілу мікрополів для зарядженої частинки ($Z \neq 0$) також неважко дослідити чисельними методами за тих самих умов $\Phi_c^{\text{SR}}(R) = 0$, $\varkappa_D = 0$, що й розподіл Гольцмарка, використовуючи загальний вираз (18.22).

Тепер ми маємо нагоду порівняти функцію розподілу мікрополів $W(\mathcal{E})$ в наближенні Гольцмарка з наближенням (18.36), яке ми знайшли в попередньому параграфі. Розклад (18.36) при малих значеннях напруженості

$$W(\mathcal{E}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \bar{\mathcal{E}}^3} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}} \right)^2 + \frac{1}{8} \left(\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}} \right)^4 + \dots \right], \quad (19.13)$$

як і розклад (19.7) для розподілу Гольцмарка, іде за парними степенями \mathcal{E} . Для чисельного порівняння коефіцієнтів цих розкладів потрібно встановити зв'язок між масштабами $\bar{\mathcal{E}}$ та \mathcal{E}_0 . Ми вже говорили, що const у виразі (18.34) для $\bar{\mathcal{E}}$ повинна бути величиною близькою до одиниці. Ми можемо зафіксувати цю сталу

просто одиницею: $\text{const} = 1$. Тепер для односортної системи

$$\bar{\mathcal{E}} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{2/3} |eZ_c| \left(\frac{N_c}{V}\right)^{2/3} = 2.598518 |eZ_c| \left(\frac{N_c}{V}\right)^{2/3}, \quad (19.14)$$

а

$$\mathcal{E}_0 = 2\pi \left(\frac{4}{15}\right)^{2/3} |eZ_c| \left(\frac{N_c}{V}\right)^{2/3} = 2.603109 |eZ_c| \left(\frac{N_c}{V}\right)^{2/3}, \quad (19.15)$$

і отже, відношення

$$\mathcal{E}_0/\bar{\mathcal{E}} = 1.001767. \quad (19.16)$$

Як бачимо, з високою точністю величини \mathcal{E}_0 і $\bar{\mathcal{E}}$ збігаються, тобто константа у визначенні $\bar{\mathcal{E}}$ і справді близька до одиниці.

Для великих значень \mathcal{E} функція $W(\mathcal{E})$ з (18.36) згасає за експоненційним законом, тоді як функція Гольцмарка згасає, згідно з (19.11), за степеневим законом $\sim \mathcal{E}^{-9/2}$.

Ми не будемо далі займатись цією грою в числа, а наведемо на рис. 13 графічне порівняння контурів Гольцмарка (19.12) і виразу, знайденого з (18.36)

$$\bar{H}\left(\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}}\right) = \bar{\mathcal{E}}w(\mathcal{E}) = \bar{\mathcal{E}}4\pi\mathcal{E}^2W(\mathcal{E})\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}}\right)^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2}. \quad (19.17)$$

§ 20. Згортка гауссівського, лоренцівського і штарківського контурів

Маючи функцію розподілу мікрополя $W(\mathcal{E})$, можемо перейти до обчислення функції $P(s, \alpha, v)$, яка визначає профіль коефіцієнта поглинання у спектральній лінії, що враховує механізми загасання, доплерівський та штарківський ефекти. Ця функція — результат згортки гауссівського, лоренцівського та штарківського контурів і, як видно з (17.16), зображується багатократним інтегралом. Виявляється, однак, що для неї можна отримати вираз у вигляді лише однократного інтеграла для лінійного ефекту

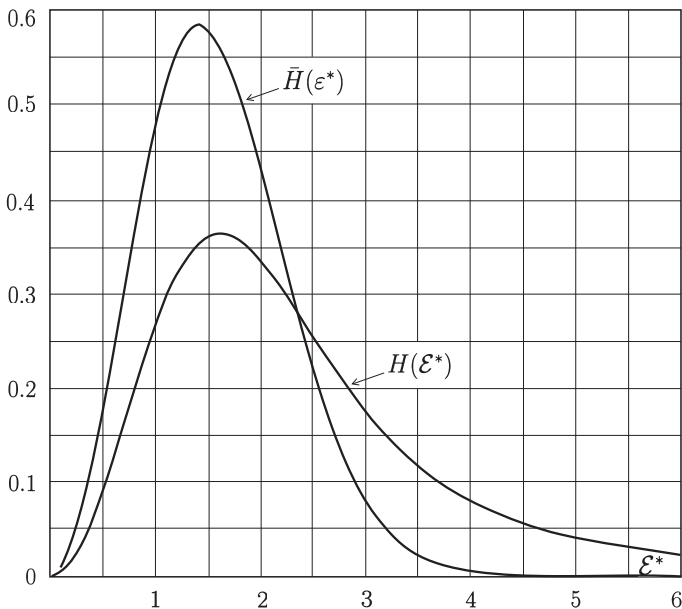


Рис. 13. Функція розподілу електричних мікрополів у плазмі: $H(\mathcal{E}^*)$ — розподіл Гольцмарка (19.12), $\tilde{H}(\mathcal{E}^*)$ — наближення (19.17).

Штарка й у вигляді двократного інтеграла для квадратичного ефекту.

Передусім, оскільки рівні енергії атома $E_a(\mathcal{E})$, $E_{a'}(\mathcal{E})$ і функція розподілу мікрополів $W(\mathcal{E})$ залежать від довжини вектора напруженості \mathcal{E} , то в інтегралі за \mathcal{E} в (17.16) можна перейти до сферичних координат і виконати інтегрування за кутовими змінними:

$$P(s, \alpha, \nu) = \int_0^{\infty} d\mathcal{E} 4\pi\mathcal{E}^2 W(\mathcal{E}) H(\alpha, \nu') = \int_0^{\infty} d\mathcal{E} w(\mathcal{E}) H(\alpha, \nu'). \quad (20.1)$$

Пригадаймо, що функція $w(\mathcal{E})$ визначена рівняннями (19.4), (19.5), а знерозмірений зсув частоти ν' фіксує рівняння (17.12). Функцію $w(\mathcal{E})$ інтегруванням частинами в (19.4) приводимо до такого

вигляду:

$$w(\mathcal{E}) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dq \cos(q\mathcal{E}) \frac{d}{dq}(qe^{-\chi q}). \quad (20.2)$$

Підставмо цей вираз у (20.1), використаємо для функції Фойґта $H(\alpha, v')$ зображення (15.9) і знайдемо:

$$\begin{aligned} P(s, \alpha, v) &= \frac{2}{\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dq \frac{d}{dq}(qe^{\chi q}) \\ &\times \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\mathcal{E} e^{-t^2/4 - \alpha t} \cos(q\mathcal{E}) \cos(v't). \end{aligned} \quad (20.3)$$

Розгляньмо спочатку лінійний ефект Штарка, який є головним механізмом розширення ліній атома водню та водневоподібних атомів.

Важливою обставиною для подальших розрахунків є те, що однорідне електричне поле, яке спричинює лінійний ефект Штарка, дає симетричний розподіл інтенсивності щодо центра спектральної лінії. Наприклад, для атома водню в першому збудженому стані, коли головне квантове число $n = 2$, а орбітальне й магнітне квантові числа $l = 0, m = 0$ та $l = 1, m = 0, \pm 1$, маємо чотирикратне виродження стану $|n, l, m\rangle$. Унаслідок цього лінійний ефект Штарка дає такі зсуви енергетичних рівнів і відповідні їм хвильові функції $|a\rangle$ [8]:

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= 3|e|a_{\text{В}}\mathcal{E}, & |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle), \\ \Delta E_2 &= -3|e|a_{\text{В}}\mathcal{E}, & |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle), \\ \Delta E_3 &= 0, & |3\rangle &= |2, 1, -1\rangle, \\ \Delta E_4 &= 0, & |4\rangle &= |2, 1, 1\rangle. \end{aligned} \quad (20.4)$$

Отже, для лінії з частотою $\omega_0 = 2\pi/\lambda$ і довжиною хвилі $\lambda = 1215.68 \text{ \AA}$ із серії Лаймана маємо переходи між штарківськими компонентами (20.4) збудженого стану $n = 2$ і основним станом $|0\rangle$ з $n = 1$ на частотах $\omega_0 + 3|e|a_B\mathcal{E}/\hbar$ та $\omega_0 - 3|e|a_B\mathcal{E}/\hbar$ і з відповідними силами осцилятора¹⁰ $f_{|1\rangle\rightarrow|0\rangle}$ та $f_{|2\rangle\rightarrow|0\rangle}$, а також переходи зі станів, де виродження не знято на незбуреній частоті ω_0 із силами осцилятора $f_{|3\rangle\rightarrow|0\rangle}$ та $f_{|4\rangle\rightarrow|0\rangle}$. Причому легко бачити, використовуючи означення сили осцилятора (11.7) і вигляд хвильових функцій (20.4), що, згідно з правилами відбору, для дипольних переходів [8] справедливі такі рівності: $f_{|1\rangle\rightarrow|0\rangle} = f_{|2\rangle\rightarrow|0\rangle}$ і $f_{|3\rangle\rightarrow|0\rangle} = f_{|4\rangle\rightarrow|0\rangle}$. Звідси робимо висновок, що сили осцилятора для переходів зі штарківських рівнів із симетричними зсувами частот (17.13) $\omega_0 \pm \alpha_{aa'}\mathcal{E}/\hbar$ рівні між собою.

Це дозволяє нам у виразі (17.15) для коефіцієнта поглинання $\varkappa(q)$ під знаком суми за штарківськими компонентами взяти у функції $P(s, \alpha, v)$ з (20.3) замість $\cos(v't)$ півсуму косинусів із $v' = \omega_0 - \alpha_{aa'}\mathcal{E}/\hbar\Delta\omega_D$ та $v' = \omega_0 + \alpha_{aa'}\mathcal{E}/\hbar\Delta\omega_D$, (див. означення (17.12) та (17.13)). Позначимо так отриману функцію для лінійного ефекту Штарка через

$$\begin{aligned}
 P_1(s, \alpha, v) &= \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dq \frac{d}{dq} (qe^{-\chi q}) \int_0^\infty dt \int_0^\infty d\mathcal{E} \\
 &\times e^{-t^2/4 - at} \cos(q\mathcal{E}) \left\{ \cos\left[(v - \alpha_{aa'}\mathcal{E}/\hbar\Delta\omega_D)t\right] \right. \\
 &\left. + \cos\left[(v + \alpha_{aa'}\mathcal{E}/\hbar\Delta\omega_D)t\right] \right\}. \tag{20.5}
 \end{aligned}$$

Розпишімо тепер за формулами з елементарної математики суму,

¹⁰ Щодо цих позначень сил осцилятора. Оскільки сили осцилятора $f_{A'A}$ визначають імовірність квантового переходу зі стану $|A'\rangle$ у стан $|A\rangle$ (і навпаки), то часто вживають позначення, указуючи стрілкою такий перехід: $f_{A'A} = f_{A'\rightarrow A} = f_{|A'\rangle\rightarrow|A\rangle}$. Для $f_{A'A}$ використовують також позначення з переставленими індексами A та A' .

а потім добутки косинусів:

$$\begin{aligned} & \cos(q\mathcal{E}) \left\{ \cos \left[(v - \alpha_{aa'} \mathcal{E} / \hbar \Delta \omega_D) t \right] + \cos \left[(v + \alpha_{aa'} \mathcal{E} / \hbar \Delta \omega_D) t \right] \right\} \\ &= \cos(q\mathcal{E}) 2 \cos(vt) \cos(\alpha_{aa'} \mathcal{E} t / \hbar) \\ &= \cos vt \left\{ \cos \left[(q + \alpha_{aa'} t / \hbar) \mathcal{E} \right] + \cos \left[(q - \alpha_{aa'} t / \hbar) \mathcal{E} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Далі скористайтесь означенням δ -функції Дірака:

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \cos(\mathcal{E}x) = \delta(x), \quad (20.6)$$

і в результаті отримуємо

$$\begin{aligned} P_1(s, \alpha, v) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dq \frac{d}{dq} (qe^{-\chi q}) \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t} \\ &\quad \times \left[\delta \left(q - \frac{\alpha_{aa'} t}{\hbar \Delta \omega_D} \right) + \delta \left(q + \frac{\alpha_{aa'} t}{\hbar \Delta \omega_D} \right) \right] \cos vt. \quad (20.7) \end{aligned}$$

Оскільки $q > 0$, $t > 0$, то за умови $\alpha_{aa'} > 0$ “працює” перша дельта-функція і знімає інтегрування за q , вимагаючи, щоб $q = \alpha_{aa'} t / \hbar \Delta \omega_D$, друга дельта-функція дає при цьому нульовий внесок. Якщо $\alpha_{aa'} < 0$, то друга дельта-функція вимагає, щоб $q = -\alpha_{aa'} t / \hbar \Delta \omega_D$ і знімає інтегрування, а перша не дає внеску:

$$\begin{aligned} P_1(s, \alpha, v) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos(vt) e^{-t^2/4 - \alpha t} \frac{d}{dt} [t e^{-\chi(t)}] dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos(vt) e^{-t^2/4 - \alpha t} \left[1 - t \frac{d\chi(t)}{dt} \right] e^{-\chi(t)} dt, \quad (20.8) \end{aligned}$$

де

$$\chi(t) = \chi_q, \quad q = |\alpha_{aa'}|t/\hbar\Delta\omega_D. \quad (20.9)$$

Інтегруванням частинами можна звільнити підінтегральний вираз від похідної $d\chi(t)/dt$:

$$P_1(s, \alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} [v \operatorname{tg}(vt) + t/2 + \alpha] e^{-t^2/4 - \alpha t - \chi(t)} \times t \cos(vt) dt. \quad (20.10)$$

Отже, ми досягли мети. Нам вдалося знайти згортку трьох контурів лоренцівського, гауссівського та штарківського у вигляді однократного інтеграла, як і для функції Фойґта (15.9).

Окремо розгляньмо випадок гольцмарківського наближення (19.2) для функції χ_q . Підстановка цього виразу у формулу (20.8) дає

$$P_1(s_1, \alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos(vt) e^{-t^2/4 - \alpha t - (s_1 t)^{3/2}} \times \left[1 - \frac{3}{2}(s_1 t)^{3/2} \right] dt, \quad (20.11)$$

де величина

$$s_1 = \frac{|\alpha_{aa'}| \mathcal{E}_0}{\hbar\Delta\omega_D} = \frac{|\alpha_{aa'}| \mathcal{E}_0 \lambda_0^2}{2\pi c \hbar \Delta \lambda_D} \quad (20.12)$$

чисельно дорівнює лінійному штарківському розщепленню спектральної лінії в полі \mathcal{E}_0 , віднесеному до її доплерівської ширини. Друга рівність у (20.12) за шкалою довжини хвиль наведена для довідки. Можна також використовувати й вираз (20.10):

$$P_1(s_1, \alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-t^2/4 - \alpha t - (s_1 t)^{3/2}} \times [v \operatorname{tg}(vt) + t/2 + \alpha] t \cos(vt) dt. \quad (20.13)$$

Для ілюстрації на рис. 14 наведено графік функції $P_1(s, \alpha, v)$ для різних значень штарківського розщеплення.

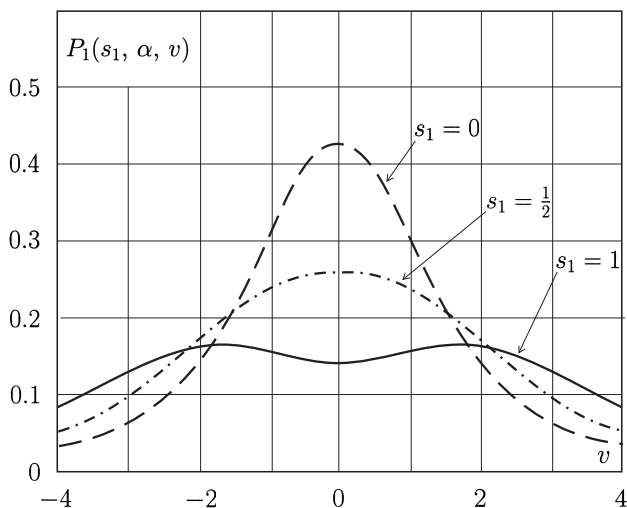


Рис. 14. Згортка (20.11) лоренцієвського, гауссівського і штарківського контурів ($\alpha = 1$).

Перейдімо до вивчення квадратичного ефекту Штарка, унаслідок якого відбувається зсув та розщеплення спектральних ліній неводневоподібних атомів. Тепер зсув енергетичних рівнів атома визначає формула (17.14) і величина v' , згідно з (17.12), дорівнює

$$v' = v - \frac{\beta_{aa'}}{2\hbar\Delta\omega_D} \mathcal{E}^2. \quad (20.14)$$

Інтегрування за \mathcal{E} в (20.3) у цьому випадку також легко виконуємо:

$$\int_0^{\infty} \cos(q\mathcal{E}) \cos\left(vt - \frac{\beta_{aa'}t}{2\hbar\Delta\omega_D} \mathcal{E}^2\right) d\mathcal{E}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(q\mathcal{E}) \cos\left(vt - \frac{\beta_{aa't}}{2\hbar\Delta\omega_D} \mathcal{E}^2\right) d\mathcal{E} \\
&= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\cos\left(vt - \frac{\beta_{aa't}}{2\hbar\Delta\omega_D} \mathcal{E}^2 - q\mathcal{E}\right) \right. \\
&\quad \left. + \cos\left(vt - \frac{\beta_{aa't}}{2\hbar\Delta\omega_D} \mathcal{E}^2 + q\mathcal{E}\right) \right] d\mathcal{E} \\
&= \frac{1}{4} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ivt} \left(e^{-iq\mathcal{E} - ip\mathcal{E}^2} + e^{iq\mathcal{E} - ip\mathcal{E}^2} \right) d\mathcal{E} \\
&= \frac{1}{4} \operatorname{Re} \lim_{\nu \rightarrow 0} e^{ivt} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-iq\mathcal{E} - (\nu + ip)\mathcal{E}^2} + e^{iq\mathcal{E} - (\nu + ip)\mathcal{E}^2} \right] d\mathcal{E} \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \lim_{\nu \rightarrow 0} \left(e^{ivt} \sqrt{\frac{\pi}{\nu + ip}} e^{-q^2/4(\nu + ip)} \right) \\
&= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{|p|}} \cos\left(\frac{p}{|p|} vt - \frac{\pi}{4} + \frac{q^2}{4|p|}\right) \\
&= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{|p|}} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{p}{|p|} vt + \frac{q^2}{4|p|}\right), \tag{20.15}
\end{aligned}$$

тут уведено проміжне позначення $p = \beta_{aa't}/2\hbar\Delta\omega_D$, знак якого зумовлює знак величини $\beta_{aa't}$; інтегруємо за виноскою на стор. 94.

Тепер з (20.3) знаходимо величину $P(s, \alpha, \nu)$, яку ми для квадратичного ефекту Штарка позначаємо індексом “2”:

$$P_2(s, \alpha, \nu) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dq \frac{d}{dq} (qe^{-\chi q}) \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t}$$

$$\times \sqrt{\frac{2\hbar\Delta\omega_D}{|\beta_{aa'}|t}} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\beta_{aa'}}{|\beta_{aa'}|}vt + \frac{q^2\hbar\Delta\omega_D}{2|\beta_{aa'}|t}\right). \quad (20.16)$$

Звідси для наближення Гольцмарка (19.2) маємо ($x = q\mathcal{E}_0$):

$$P_2(s_2, \alpha, v) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dx \left(1 - \frac{3}{2}x^{3/2}\right) e^{-x^{3/2}} \int_0^\infty dt \\ \times e^{-t^2/4 - \alpha t} \frac{1}{\sqrt{|s_2|t}} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{s_2}{|s_2|}vt + \frac{x^2}{4s_2t}\right), \quad (20.17)$$

де

$$s_2 = \frac{\beta_{aa'}\mathcal{E}_0^2}{2\hbar\Delta\omega_D} = \frac{\beta_{aa'}\mathcal{E}_0^2\lambda_0^2}{4\pi c\hbar\Delta\lambda_D}, \quad (20.18)$$

причому друга рівність подає значення s_2 за шкалою довжин хвиль.

Очевидно, що повинна виконуватись умова (17.19):

$$P_2(0, \alpha, v) = H(\alpha, v),$$

тобто при “вимкненому” ефекті Штарка для спектральної лінії отримуємо контур Фойґта. Вона й справді виконується, оскільки

$$\lim_{s_2 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{|s_2|t}} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{s_2}{|s_2|}vt + \frac{x^2}{4s_2t}\right) \\ = \lim_{s_2 \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\sqrt{|s_2|t}} \sin\left(\frac{x^2}{4s_2t}\right) \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{s_2}{|s_2|}vt\right) \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{|s_2|t}} \cos\left(\frac{x^2}{4s_2t}\right) \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{s_2}{|s_2|}vt\right) \right] \\ = \sqrt{2\pi} \delta(x) \lim_{s_2 \rightarrow 0} \left[\cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{s_2}{|s_2|}vt\right) + \sin\left(\frac{\pi}{4} + \frac{s_2}{|s_2|}vt\right) \right] \\ = 2\sqrt{\pi} \delta(x) \cos vt. \quad (20.19)$$

Ми використали тут таке зображення для дельта-функції Дірака¹¹:

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\nu}} \cos\left(\frac{x^2}{\nu}\right) = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\nu}} \sin\left(\frac{x^2}{\nu}\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \delta(x). \quad (20.20)$$

Тепер інтеграл за x з δ -функцією в (20.17) дає $1/2$, оскільки нижня межа інтегрування дорівнює нулеві:

$$\int_0^{\infty} \delta(x) dx = \frac{1}{2}.$$

Отже, у результаті ми приходимо при $s_2 = 0$ у (20.17) до інтегрального зображення (15.9) для функції Фойгта.

Знайдені в цьому параграфі формули¹², що визначають згортку трьох контурів, зручні для практичних розрахунків коефіцієнта поглинання, який спільно формують механізм загасання атомних станів та доплерівський і штарківський механізми розширення спектральних ліній атомів. Їхній достатньо простий вигляд великою мірою визначає успіх в інтегруванні рівняння переносу випромінювання, оскільки густина зоряної атмосфери N/V , її температура T , а також стала загасання γ , доплерівський зсув частоти $\Delta\omega_D$ та величина χ_q є функціями координат. Отже, нам потрібно мати не табличні значення коефіцієнта поглинання як функції частоти для деяких значень перелічених величин, а саме їхні аналітичні вирази, зручні для комп'ютерних розрахунків.

¹¹Покажемо, що це справді δ -функція. Візьмімо “хорошу” функцію $f(x)$ і обчислім такий інтеграл: $\lim_{\nu \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \cos(x^2/\nu) 1/\sqrt{\nu} =$ (заміна $y = \frac{x}{\sqrt{\nu}}$) = $\lim_{\nu \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dy f(\sqrt{\nu}y) \cos y^2 = f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos y^2 = \sqrt{\pi/2} f(0)$. За означенням, саме так діє δ -функція. Аналогічно поводимо себе із синус-зображенням δ -функції у (20.20).

¹²Уперше ці формули знайдено у статті: Вакарчук І. А., Бабий Б. Т., Рыкалюк Р. Е. К теории коэффициента поглощения в спектральной линии. — Киев: Институт теоретической физики АН УССР. Препринт ИТФ-82-139 Р, 1982.— 22 с.

Цікаво ще обчислити функцію $P(s, \alpha, v)$, використовуючи наближений вираз (18.36) для функції розподілу мікрополів. Згідно з (20.1):

$$\begin{aligned}
 P(s, \alpha, v) &= \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \, 4\pi \mathcal{E}^2 W(\mathcal{E}) H(\alpha, v') \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\bar{\mathcal{E}}^3} \int_0^{\infty} \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} H(\alpha, v') d\mathcal{E} \\
 &= \frac{\sqrt{2}}{\pi \bar{\mathcal{E}}^3} \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \, \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} e^{-t^2/4 - \alpha t} e^{iv't}. \quad (20.21)
 \end{aligned}$$

Ми використали тут для функції Фойгта зображення (15.9).

Тепер знову скористаємось міркуваннями про симетричний зсув частоти лінійним ефектом Штарка, як і при отриманні формули (20.5). Отже,

$$\begin{aligned}
 P_1(\bar{s}_1, \alpha, v) &= \frac{1}{\pi \sqrt{2} \bar{\mathcal{E}}^3} \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \, \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} \\
 &\times e^{-t^2/4 - \alpha t} \left\{ \cos \left[(v - \alpha_{aa'} \mathcal{E} / \hbar \Delta \omega_D) t \right] + \cos \left[(v + \alpha_{aa'} \mathcal{E} / \hbar \Delta \omega_D) t \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{\pi \sqrt{2} \bar{\mathcal{E}}^3} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \, \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} \\
 &\times e^{-t^2/4 - \alpha t + ivt} \left\{ e^{-i\alpha_{aa'} \mathcal{E} t / \hbar \Delta \omega_D} + e^{i\alpha_{aa'} \mathcal{E} t / \hbar \Delta \omega_D} \right\}
 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{2}\mathcal{E}^3} \int_0^{\infty} dt \cos vt e^{-t^2/4-\alpha t} \quad (20.22)$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{E} \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} \cos(\alpha_{aa'} \mathcal{E} t / \hbar \Delta \omega_D),$$

а інтеграл за \mathcal{E} неважко взяти:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{E} \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} \cos(\alpha_{aa'} \mathcal{E} t / \hbar \Delta \omega_D) \\ &= - \left(\frac{\hbar \Delta \omega_D}{\alpha_{aa'}} \right)^2 \frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{E} e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} e^{-i\alpha_{aa'} \mathcal{E} t / \hbar \Delta \omega_D} \\ &= - \left(\frac{\hbar \Delta \omega_D}{\alpha_{aa'}} \right)^2 \frac{d^2}{dt^2} \bar{\mathcal{E}} \sqrt{2\pi} e^{-(\bar{s}_1 t)^2/2} \\ &= \bar{\mathcal{E}}^3 \sqrt{2\pi} \left[1 - (\bar{s}_1 t)^2 \right] e^{-(\bar{s}_1 t)^2/2}, \end{aligned} \quad (20.23)$$

де

$$\bar{s}_1 = \frac{|\alpha_{aa'}| \bar{\mathcal{E}}}{\hbar \Delta \omega_D}. \quad (20.24)$$

Тепер підставляємо (20.23) у (20.22) і остаточно знаходимо:

$$P_1(\bar{s}_1, \alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \left[1 - (\bar{s}_1 t)^2 \right] e^{-t^2/4-\alpha t - (\bar{s}_1 t)^2/2} \cos vt dt. \quad (20.25)$$

Графік цієї функції для різних значень параметра \bar{s}_1 подано на рис. 15.

Формулу (20.25) потрібно порівняти з виразом (20.11), отриманим у наближенні Гольцмарка. Графічне порівняння наведено на рис. 16.

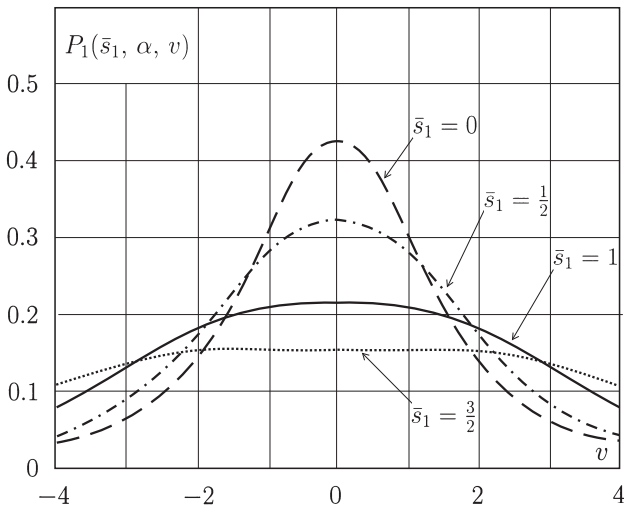


Рис. 15. Профіль коефіцієнта поглинання (17.15), (20.25) у спектральній лінії для лінійного ефекту Штарка з різними значеннями параметра \bar{s}_1 з (20.24) при $\alpha = 1$.

Для квадратичного ефекту Штарка з (20.21) з урахуванням (20.14) знаходимо

$$P_2(\bar{s}_2, \alpha, \nu) = \frac{\sqrt{2}}{\pi \bar{\mathcal{E}}^3} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t + i \nu t} \times \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} e^{-i\bar{s}_2 t \mathcal{E}^2/\bar{\mathcal{E}}^2}, \quad (20.26)$$

де ми ввели позначення

$$\bar{s}_2 = \frac{\beta_{aa'} \bar{\mathcal{E}}^2}{2\hbar\Delta} \omega_D. \quad (20.27)$$

Обчислимо інтеграл за \mathcal{E} :

$$\int_0^{\infty} d\mathcal{E} \mathcal{E}^2 e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} e^{-i\beta_{aa'} \mathcal{E}^2 t/2\hbar\Delta\omega_D}$$

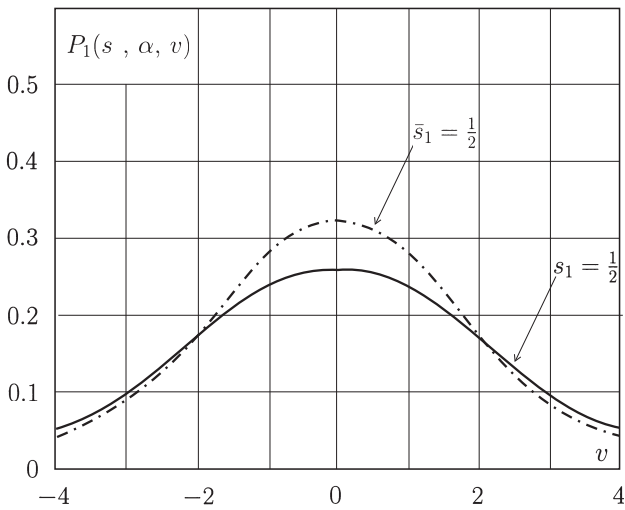


Рис. 16. Порівняння профілів коефіцієнта поглинання в спектральній лінії для лінійного ефекту Штарка ($\alpha = 1$): суцільна крива — згортка гауссівського, лоренцівського і гольцмарківського контурів (20.11) для $s_1 = 1/2$; штрихова крива — згортка (20.25) гауссівського, лоренцівського контурів з наближенням (18.36) для розподілу електричних мікрополів для $\bar{s}_1 = 1/2$.

$$\begin{aligned}
 &= i \frac{\hbar \Delta \omega_D}{\beta_{aa'}} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{E} e^{-\mathcal{E}^2/2\bar{\mathcal{E}}^2} e^{-i\beta_{aa'}\mathcal{E}^2 t/2\hbar\Delta\omega_D} \\
 &= i \frac{\hbar \Delta \omega_D}{\beta_{aa'}} \frac{d}{dt} \sqrt{\frac{\pi}{(1/2\bar{\mathcal{E}}^2 + i\beta_{aa'}t/2\hbar\Delta\omega_D)}} \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \bar{\mathcal{E}}^3 (1 + 2i\bar{s}_2 t)^{-3/2}, \tag{20.28}
 \end{aligned}$$

Тепер з (20.26) та (20.28) знаходимо

$$P_2(\bar{s}_2, \alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t}$$

$$\times e^{ivt} (1 + 2i\bar{s}_2 t)^{-3/2}. \quad (20.29)$$

Оскільки

$$1 + 2i\bar{s}_2 t = \sqrt{1 + (2\bar{s}_2 t)^2} e^{i\varphi},$$

$$\varphi = \arctg(2\bar{s}_2 t),$$

то дійсну частину в (20.29) легко відшукуємо. Остаточоно:

$$P_2(\bar{s}_2, \alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt e^{-t^2/4 - \alpha t} \times \frac{\cos\left[vt - \frac{3}{2}\arctg(2\bar{s}_2 t)\right]}{[1 + (2\bar{s}_2 t)^2]^{3/4}}. \quad (20.30)$$

Цей вираз потрібно порівнювати з формулою (20.17). Він є зручнішим, ніж (20.17), оскільки зображений однократним інтегралом, що значно полегшує чисельні розрахунки. На рис. 17 подано графік функції $P_2(\bar{s}_2, \alpha, v)$.

§ 21. Релаксаційна теорія ударного наближення

За своїм змістом ударне наближення відповідає тому, що збурюючі частинки налітають на вибраний атом і “скидають” його зі стану $|A\rangle$ в інші стани. Тобто цю взаємодію ми можемо розглянути як процес зіткнення. У зв’язку з цим ми можемо спростити нашу побудову теорії ударного наближення, використавши такі міркування.

Вивчаючи теорію природної ширини спектральної лінії, ми бачили, що при врахуванні скінченного часу життя атома в стані $|A\rangle$, внаслідок його квантового переходу в інші стани, хвильова функція набуває додаткового множника $e^{-i\Delta E_A t/\hbar - \gamma_A t/2}$, причому

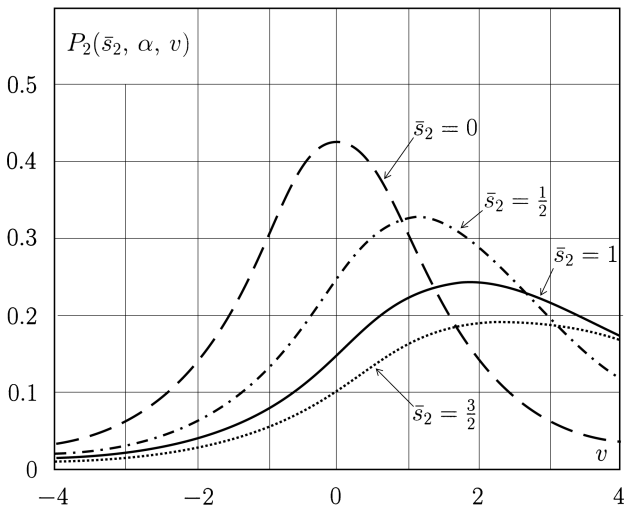


Рис. 17. Контур коефіцієнта поглинання в спектральній лінії для квадратичного ефекту Штарка ($\alpha = 1$): згортка (20.30) гауссівського, лоренцівського контурів з розподілом (18.36) електричних мікрополів для різних значень параметра \bar{s}_2 .

декремент загасання γ_A дорівнює ймовірності квантового переходу атома за одиницю часу зі стану $|A\rangle$ у всі інші стани.

Далі, як ми бачили в § 12, такий часовий фактор у хвильовій функції приводить урешті-решт до лоренцівського контуру спектральної лінії зі сталою загасання та зсувом резонансної частоти.

Ми просимо Читача ще раз повернутись до § 10 й уважно перечитати його, спроектувавши зміст на наш теперішній випадок, коли до взаємодії оптичного електрона з електромагнітним випромінюванням, яке спричинює квантові переходи зі стану $|A\rangle$, потрібно додати ще його взаємодію з тими навколишніми частинками, які збуджують вибраний атом і переводять його із цього стану в інший за ударним механізмом. У § 10 ми спеціально докладно й акуратно розглянули теорію квазістаціонарних станів, відзначивши при цьому необхідність зроблених висновків у подальшому викладі.

Тепер перед нами постає важливе питання про конкретні обчислення сталої загасання та зсуву частоти. Для цих розрахунків ми можемо, як і в § 10, скористатись методами теорії збурень стосовно до енергії взаємодії оптичного електрона атома із збурюючими частинками оточення. При цьому енергію збурення подібно до того, як ми це робили в § 17, розкладаємо в мультипольний ряд типу (17.6). Наприклад, для нейтральних атома і збурюючих частинок актуальним у цьому розкладі буде член із диполь-дипольною взаємодією. Головний доданок у першому порядку теорії збурень дасть, очевидно, нульовий результат унаслідок усереднення за кутами. Тому перші незникаючі внески отримуємо лише у другому порядку теорії збурень. Це відповідає тому, що діагональні матричні елементи V_{ii} , V_{ff} у рівняннях (10.5) дорівнюють нулеві. Стандартна теорія ударного наближення як класична, так і квантова, достатньо детально викладена в [21]. Рекомендуємо також заглянути в невелику за обсягом, але корисну книжку [6], де серед інших питань теорії зоряних спектрів подано й теорію розширення ліній унаслідок зіткнень через ударне наближення. Можна також поповнити свої знання в цьому питанні і з [7] та [22].

Ми скористаємось іншим підходом. Пригадаймо з теорії розсіяння означення перерізу зіткнень [8]. Переріз зіткнень σ визначаємо як відношення ймовірності переходу за одиницю часу до густини падаючого потоку, який у нашому випадку для атома, що випромінює або поглинає світло на частоті ω_0 , дорівнює $N_p v/V$, де v — величина відносної швидкості атома і збурюючих частинок, а N_p/V — густина збурюючих частинок. Тому величину декременту загасання і зсув частоти можна визначити через переріз зіткнень σ . Теорія розсіяння є добре розвинутою, і для обчислення сталої загасання $\gamma_{A'A}$ та зсуву частоти $\Delta\omega_{A'A}$ можна використати, залежно від умов задачі, потужні методи, створені для розрахунку σ ¹³. Підемо саме цим шляхом.

¹³Постановка задачі в теорії розсіяння є простою: за відомими імпульсом \mathbf{p} й енергією E частинки, яка налітає на мішень, знайти ймовірність того, що після розсіяння частинка буде мати імпульс \mathbf{p}' й енергію E' . Але розрахунок

Отже, за означенням стала загасання γ_A квазістаціонарного стану $|A\rangle$ дорівнює ймовірності переходу атома за одиницю часу з цього стану у всі інші стани, усередненій за станами системи збурюючих частинок оточення (це середнє будемо позначати ламаними дужками), і згідно зі сказаним вище

$$\gamma_A = \frac{N_p}{V} \langle v\sigma \rangle. \quad (21.1)$$

Переріз розсіяння можна виразити через уявну частину амплітуди розсіяння вперед f [8]:

$$\sigma = \frac{4\pi\hbar}{Mv} \text{Im } f, \quad (21.2)$$

M — приведена маса атома (величина $1/M$ дорівнює сумі обернених мас атома і налітаючої частинки). Амплітуда розсіяння f дорівнює матричному елементу так званого оператора розсіяння з множником $(-MV/2\pi\hbar^2 N_p)$. Дійсна частина діагонального матричного елемента цього оператора для стану $|A\rangle$ дорівнює

цієї величини, яка дозволяє винаходити просторову структуру мішені та її енергетичний спектр, є дуже не простою проблемою. Наведемо ще деякі приклади подібної ситуації.

У теорії чисел деякі задачі є надзвичайно простими за своїм формулюванням, і здавалося б, не мають жодної цінності, як наприклад, ознака подільності числа на деяке задане число. Однак потужні математичні методи, які математики творять при встановленні цих ознак та теореми, що доводять при цьому, становлять самостійний інтерес і дозволяють розв'язати низку інших складних нетривіальних задач, далеких від вихідної.

Лібрето, наприклад, опери так само часто є настільки банальними, що не становлять якогось надзвичайного самостійного інтересу. Однак, створена композитором музика, спів артистів з їх перевтіленням, сценографія — це все разом творить під час вистави в театрі незбагненно таємничу атмосферу і викликає десь із надр підсвідомості глядача глибокі душевні переживання з відчуттям естетичного задоволення, аж ніяк не несумірні з самим лібрето.

Нехитромудрий анекдот про лжеревізора талант М. В. Гоголя перетворив у безсмертну комедію, яка від 1836 року висміює з театральної сцени як в окремії людині, так і в суспільстві те, що справді гідне всезагальної осуди.

зсуву енергії¹⁴:

$$\Delta E_A = \text{Re} \left(-\frac{2\pi\hbar^2 N_p}{MV} f \right). \quad (21.3)$$

Рівняння (21.1)–(21.3) можна об'єднати в одне:

$$\frac{\Delta E_A}{\hbar} - i\frac{\gamma_A}{2} = -\left\langle \frac{2\pi\hbar N_p}{MV} f \right\rangle, \quad (21.4)$$

або

$$\frac{i}{\hbar}\Delta E_A + \frac{\gamma_A}{2} = -i\left\langle \frac{2\pi\hbar N_p}{MV} f \right\rangle. \quad (21.5)$$

Маємо повну аналогію цього рівняння з рівняннями (10.14), (10.15) або з (12.4), які визначають зсув енергетичного рівня і загасання атомного стану внаслідок радіаційних ефектів.

Рівняння (21.5) є основним рівнянням для визначення величин ΔE_A та γ_A , тому перекинемо зараз увагу на амплітуду розсіювання f . Для її обчислення можна використовувати різні методи, створені в теорії розсіювання.

Метод парціальних хвиль дозволяє зобразити амплітуду розсіювання вперед через парціальні внески з різними значеннями орбітального квантового числа l , залежні від додаткової фази розсіювання δ_l [8]:

$$f = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(1 - e^{2i\delta_l} \right), \quad (21.6)$$

де $k = Mv/\hbar$.

Тепер з (21.5), (21.6) маємо

$$\frac{i}{\hbar}\Delta E_A + \frac{\gamma_A}{2} = \frac{\pi\hbar N_p}{MV} \left\langle \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(1 - e^{2i\delta_l} \right) \right\rangle. \quad (21.7)$$

¹⁴Детальний розгляд цих співвідношень відсунув би нас далеко в бік від нашого питання, і тому ми відсилаємо Читача до теорії розсіювання, викладеної в будь-якому підручнику з квантової механіки, наприклад [8, 13], а також [23].

Обчислення зсуву фаз δ_l для довільного поля можна провести, коли рух частинок є квазікласичним, тобто коли головний внесок визначають великі значення орбітального квантового числа l . Для важких частинок, якими є атоми, їх рух у зоряній атмосфері задовольняє умови квазікласичності, а для електронів таке наближення для δ_l може дати лише якісні результати. Скористаємось цим наближенням і запишемо вираз для фази δ_l у випадку, коли взаємодія атома, що перебуває у стані $|A\rangle$, з частинками оточення описується потенціальною енергією $U_A(r)$ [13]:

$$\delta_l = -\frac{M}{\hbar^2} \int_{r_0}^{\infty} \frac{U_A(r) dr}{\sqrt{k^2 - (l + 1/2)^2 / r^2}}, \quad (21.8)$$

r_0 — корінь підкореневого виразу.

У квазікласичному наближенні момент імпульсу частинки дорівнює $\hbar(l + 1/2)$, а з іншого боку, ця величина може бути записана через “прицільну відстань” ρ як $Mv\rho$, і отже,

$$Mv\rho = \hbar(l + 1/2). \quad (21.9)$$

Тому вираз (21.8) можна записати через величину ρ :

$$\delta = 2\delta_l = -\frac{2}{v\hbar} \int_{\rho}^{\infty} \frac{U_A(r) dr}{\sqrt{1 - (\rho/r)^2}}. \quad (21.10)$$

Беручи до уваги (21.9), у виразі (21.7) можна перейти у квазікласичному наближенні від підсумовування за орбітальним квантовим числом l до інтегрування за ρ :

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \left(1 - e^{2i\delta_l}\right) = 2 \left(\frac{Mv}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\infty} \rho \left(1 - e^{i\delta}\right) d\rho, \quad (21.11)$$

оскільки

$$(2l + 1) = \frac{2Mv\rho}{\hbar}, \quad (21.12)$$

а

$$dl = \frac{Mv}{\hbar} d\rho.$$

Тепер з (21.7) знаходимо остаточно:

$$\frac{i}{\hbar} \Delta E_A + \frac{\gamma_A}{2} = \frac{N_p}{V} \left\langle v \int_0^\infty (1 - e^{i\delta}) 2\pi\rho d\rho \right\rangle. \quad (21.13)$$

Усереднення за станами збурюючих частинок у цій формулі зводиться до усереднення за швидкостями, від яких залежить і фаза δ з (21.10).

Формула (21.13) працює як для пружних, так і для непружних зіткнень. Для непружних зіткнень фаза δ є величиною комплексною, $\delta = \delta' + i\delta''$, де дійсну частину δ' визначає, як і раніше, формула (21.10), а для уявної частини фази δ'' потрібно робити окремі припущення.

Щоб урахувати в коефіцієнті поглинання $\varkappa(q)$ квазістаціонарність квантових станів атома, зумовлених його взаємодією з частинками оточення, стартуємо з виразу (12.6), у якому враховано ефект радіаційного загасання:

$$\begin{aligned} \varkappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{A,A'} \rho_A f_{A'A}(q) \\ &\times \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt e^{i(\omega - \omega_{A'A} - \Delta\omega_{A'A})t} e^{-\gamma_{A'A}t/2}. \end{aligned} \quad (21.14)$$

Тобто для контуру Лоренца в (12.6) ми взяли інтегральне зображення. Пригадаймо, що сукупність квантових чисел A та A' — це квантові числа, які визначають стан повної системи “атом плюс збурюючі частинки”. Крім того, розглянемо поглинання N атомів певного сорту, і зважаючи на те, що кожен атом дає незалежний внесок у коефіцієнт поглинання, сума за частинками, яка фігурує у (12.6), дає у (21.14) множник N .

Оскільки радіаційний зсув частоти і стала загасання залежать фактично лише від квантових чисел ізолюваного атома¹⁵, то зручно ввести для них спеціальні позначення, яких будемо надалі дотримуватись:

$$\Delta\omega_{A'A} = \Delta\omega_0, \quad \gamma_{A'A} = \gamma_0, \quad (21.15)$$

де ω_0 — частота переходу для ізолюваного атома.

Далі повторюємо міркування, наведені в § 12 при врахуванні природної ширини спектральної лінії, і робимо такий формальний крок. Енергії $E_{A'}$ та E_A , що входять в означення частоти $\omega_{A'A} = (E_{A'} - E_A)/\hbar$ у формулі (21.14) замінюємо на такі величини:

$$-iE_{A'} \rightarrow -i(E_{A'} + \Delta E_{A'}) - \frac{\gamma_{A'}}{2},$$

$$iE_A \rightarrow i(E_A + \Delta E_A) - \frac{\gamma_A}{2},$$

де зсув енергетичних рівнів і сталі загасання визначені формулою (21.13). При цьому слід підкреслити, що ми неявно припускаємо, що квазістаціонарність станів атома при його зіткненнях зі збурюючими частинками створюється незалежно для $|A\rangle$ та $|A'\rangle$ станів.

Нарешті після справді елементарних перетворень отримаємо остаточну формулу для коефіцієнта поглинання в лінії:

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{A,A'} \rho_{Af_{A'A}}(q) \\ &\times \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_{A'A} - \Delta)^2 + (\gamma/2)^2}, \end{aligned} \quad (21.16)$$

де зсув частоти

$$\Delta = \Delta\omega_0 + \Delta\omega_{A'A},$$

¹⁵ Поправка цих величин від збурення є величиною вищого порядку мализни порівняно з тими ефектами, які ми беремо тут до уваги.

$$\Delta\omega_{A'A} = (\Delta E_{A'} - \Delta E_A)/\hbar,$$

а стала загасання

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_{A'A},$$

$$\gamma_{A'A} = \gamma_{A'} + \gamma_A.$$

Ми завершуємо розгляд теорії ударного наближення. Воно, як уже було відзначено на початку параграфа, також приводить до лоренцівського характеру профілю коефіцієнта поглинання зі сталою загасання, що дорівнює сумі природної ширини γ_0 та сталої $\gamma_{A'A}$, яку творять міжчастинкові зіткнення.

Відзначимо, що наш підхід до розрахунку розширення спектральних ліній через ударний механізм дещо відрізняється від того, який описаний у багатьох монографіях (див., наприклад, [6, 7, 21, 22]), не зважаючи на те, що остаточні формули майже збігаються (якщо збурюється лише один із рівнів, то ці формули збігаються). Ми не будемо порівнювати ці підходи (допитливого Читача відсилаємо до вказаних книжок), а ще раз наголосимо, що запропонована тут теорія ідентична релаксаційній теорії природної ширини спектральної лінії.

Зробимо ще одне зауваження. По-перше, вираз (21.16) для коефіцієнта поглинання в лінії на частоті ω_0 записано для конкретного переходу $A' \rightarrow A$, але ми залишаємо й підсумовування за A і A' . Це пов'язано з тим, що стани можуть бути виродженими, тобто коли одному значенню енергії відповідають декілька хвильових функцій $|A\rangle$ та $|A'\rangle$, і отже, повний внесок у $\varkappa(q)$ на цій частоті ω_0 дає сума за всіма переходами між початковим і кінцевим енергетичними рівнями. А по-друге, тепер ми можемо, залишивши в (21.16) суми за наборами квантових чисел A і A' , “увімкнути” інший тип збурення атома оточенням, тобто квазістатичне, а також “запустити” атом у тепловий та турбулентні

рухи. Ми про ці ефекти не забули, а мовчки “тримали й тримаємо їх у голові”, щоб не захарашувати позначеннями сам виклад суті ударного наближення. Це відповідає виконанню того завдання, яке ми ставили в § 16 щодо врахування впливу міжчастинкових взаємодій на розширення атомних спектральних ліній: спочатку беремо до уваги швидкі рухи збурюючих частинок (ударне наближення), а після того проводимо розрахунок повільних рухів за схемою квазістатичного наближення.

Запишемо коефіцієнт поглинання в лінії як функцію довжини хвилі λ . Для цього позначимо відхилення частоти ω від резонансної частоти атома, зміщеної внаслідок його взаємодії зі збурюючими частинками

$$\Delta\omega = \omega - (\omega_{A'A} + \Delta). \quad (21.19)$$

Беручи до уваги те, що в контурі лінії це відхилення є малим і частота $\omega = kc = 2\pi c/\lambda$, можемо записати, що

$$\Delta\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2}\Delta\lambda, \quad (21.20)$$

де

$$\Delta\lambda = \lambda - (\lambda_0 + \Delta_\lambda), \quad (21.21)$$

λ_0 — довжина хвилі електромагнітного випромінювання ізольованого атома для переходу $|A'\rangle \rightarrow |A\rangle$, Δ_λ — зсув цієї резонансної довжини хвилі, що відповідає величині Δ з (21.17) у частотній шкалі. З урахуванням (21.19)–(21.21) з формули (21.16) знаходимо коефіцієнт поглинання в лінії в шкалі довжин хвиль:

$$\begin{aligned} \kappa_\lambda(\alpha, \Omega) &= \frac{e^2\lambda^2 N}{mc^2 V} \left(1 - e^{-2\pi c\hbar/\lambda T}\right) \\ &\times \sum_{A, A'} \rho_{A'A} f_{A'A}(q) \frac{\gamma_\lambda/2\pi}{(\Delta\lambda)^2 + (\gamma_\lambda/2)^2}, \end{aligned} \quad (21.22)$$

де стала загасання в шкалі довжин хвиль:

$$\gamma_\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c}\gamma, \quad (21.23)$$

причому $q = (\alpha, \mathbf{k})$, $k = |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$. Величина γ_λ має розмірність довжини і, як γ з (21.18), залежить від квантових чисел A' , A .

Таким чином, для профілю коефіцієнта поглинання з урахуванням усіх розглянутих у цьому розділі механізмів розширення спектральних ліній залишаються справедливими формули (13.18)–(13.22) або (17.15) з відповідними виразами для функції (17.16), яка є згортокою Гауссівського, лоренцівського і штарківського контурів.

§ 22. Вплив магнітного поля зір на контури спектральних ліній

Як відомо, магнітне поле спричинює розщеплення енергетичних рівнів атома — ефект Зеемана. В однорідному полі додаткова енергія атома в стані $|A\rangle$ дорівнює

$$\Delta E_A = -\mu_B g_A \mathcal{H} \hbar m_A, \quad (22.1)$$

де $\mu_B = e/2mc$ — магнетон Бора, g_A — множник Ланде, m_A — магнітне квантове число, \mathcal{H} — напруженість магнітного поля. Це зумовлює відповідне зееманівське розщеплення спектральних ліній:

$$\omega_0 \rightarrow \omega_0 + \mu_B g_{A'} \mathcal{H}, \quad (22.2)$$

де

$$g_{A'A} = -(g_{A'} m_{A'} - g_A m_A). \quad (22.3)$$

Число компонент визначається наборами квантових чисел початкового й кінцевого станів A , A' . Зміна магнітного квантового числа для дозволених переходів диктується правилами відбору, які своєю чергою впливають з умови відмінності від нуля величини $f_{A'A}(q)$. Зокрема для дипольного випромінювання магнітне квантове число або не змінюється, або змінюється на ± 1 . Розрахунок величини $f_{A'A}(q)$ на відповідних хвильових функціях

вирішує також питання поляризації випромінювання, що поглинається атомами.

Наявність у зорі глобального магнітного поля певного напрямку приведе лише до розщеплення спектральних ліній. Однак якщо це загальне поле є слабким, то потрібно враховувати локальні магнітні поля, які виникають через нерегулярні турбулентні рухи і мають різні напрямки. Внаслідок цього хаотичного розподілу напруженостей магнітних полів за величиною і напрямками виникає додаткове розширення спектральних ліній. Хоча це розширення здебільшого є незначним, його врахування дає додаткову інформацію про поле турбулентних швидкостей в атмосфері зорі.

Мікроскопічний підхід до проблеми врахування впливу магнітного поля зорі на спектральні лінії атомів полягає в розрахунку функції розподілу магнітних мікрополів. З цією метою знаходимо спочатку векторний потенціал поля, яке створюють усі рухомі заряди в точці \mathbf{R} , де розташовано виділений атом:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{c} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{|e| Z_j \mathbf{v}_j}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_j|}, \quad (22.4)$$

де Z_j — заряд частинки (для електронів $Z_j = -1$), \mathbf{R}_j — координата j -го заряду, \mathbf{v}_j — його швидкість, N_p — їх кількість. Далі обчислюємо, згідно з означенням, напруженість магнітного поля в точці спостереження \mathbf{R} , яке залежатиме від координат та швидкостей усіх зарядів: $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p})$. Після цього обчислюємо функцію розподілу магнітних мікрополів

$$W(\mathcal{H}) = \langle \delta[\mathcal{H} - \mathcal{H}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p})] \rangle, \quad (22.5)$$

де ламаними дужками позначено усереднення за всіма можливими конфігураціями $(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p})$ збудованих атом частинок та за розподілом їхніх швидкостей $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p})$.

Якщо ми одночасно повинні враховувати вплив електричного й магнітного полів на атом, то усереднення за координатами

стосуватиметься добутку дельта-функцій:

$$W(\boldsymbol{\mathcal{E}}, \boldsymbol{\mathcal{H}}) = \langle \delta[\boldsymbol{\mathcal{E}} - \boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p})] \times \delta[\boldsymbol{\mathcal{H}} - \boldsymbol{\mathcal{H}}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p})] \rangle, \quad (22.6)$$

де величину $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p})$ дає формула (17.5). Причому зрозуміло, що усереднення за швидкостями стосується лише “магнітної” дельта-функції в означенні (22.6). Таким чином, функція розподілу мікрополів ураховуватиме й перехресні ефекти магнітного та електричного полів. Ми не будемо займатись тут цією цікавою проблемою, а з огляду на те, що в квадратичному за флюктуаціями наближенні таких перехресних доданків, унаслідок усереднення за швидкостями, немає і що у вищих порядках вплив магнітних полів є незначним, приймаємо, що середнє в (22.6) можна розбити на добуток середніх. Отже, займемось знаходженням функції розподілу магнітних полів (22.5).

Для розрахунку $W(\boldsymbol{\mathcal{H}})$ скористаємось тим наближенням методом, який ми запропонували в § 18 для обчислення функції розподілу електричних мікрополів, що привів до формули (18.36). Як ми бачили в §§ 19–20, цей наближений підхід дає достатньо добре узгодження з точними розрахунками.

Отже, використовуючи інтегральне зображення дельта-функції, записуємо функцію $W(\boldsymbol{\mathcal{H}})$ з (22.5) так:

$$W(\boldsymbol{\mathcal{H}}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\boldsymbol{\mathcal{H}}} \langle e^A \rangle, \quad (22.7)$$

$$A = -i\mathbf{p}\boldsymbol{\mathcal{H}}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p}). \quad (22.8)$$

Для середнього, що входить під інтеграл, використовуємо зображення (18.25) з використанням незвідних середніх $A^{[n]}$ з (18.26). Причому, як і раніше, обмежимося лише двома першими членами:

$$\langle e^A \rangle = \exp \left(A^{[1]} + \frac{1}{2} A^{[2]} \right). \quad (22.9)$$

Якщо частина речовини зорі здійснює рух як ціле з певною швидкістю, то швидкість кожної частинки складається з векторної суми деякої сталої швидкості та швидкості теплового й мікротурбулентного рухів. Наявність однакової спільної компоненти швидкості частинок приводить до того, що середнє $\langle A \rangle$ не дорівнюватиме нулеві в точці спостереження \mathbf{R} , як це було для електричного поля (18.29). Отже, у цьому випадку зоря має глобальне поле напруженості

$$\mathcal{H}_0 = \langle \mathcal{H}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p}) \rangle, \quad (22.10)$$

а

$$A^{[1]} = \langle A \rangle = -i\rho\mathcal{H}_0. \quad (22.11)$$

Якщо таких глобальних рухів з певним напрямком немає, то очевидно, що $\mathcal{H}_0 = 0$.

Поле \mathcal{H}_0 може повільно (порівняно з атомними масштабами) змінюватись у часі. Ця зміна може мати й періодичний характер, що відповідатиме обертанню зорі. Ми не зупиняємось на розрахунку напруженості поля \mathcal{H}_0 , хоча прикидно його можна знайти, пов'язавши \mathcal{H}_0 з механічним моментом імпульсу зоряної речовини. Отже, вважаємо, що \mathcal{H}_0 є відомою величиною і повну напруженість магнітного поля можна записати як суму глобальної і флюктуаційної складових:

$$\begin{aligned} & \mathcal{H}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p}) \\ &= \mathcal{H}_0 + \Delta\mathcal{H}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p}; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_p}), \end{aligned} \quad (22.12)$$

де флюктуаційний доданок $\Delta\mathcal{H}$ зумовлений тепловими й мікротурбулентними рухами зарядів, причому, як випливає з (22.10), середнє $\langle \Delta\mathcal{H} \rangle = 0$.

Незвідне середнє $A^{[2]}$ пропорційне до середньоквадратичної флюктуації напруженості магнітного поля, і легко бачити, що стала складова \mathcal{H}_0 у виразі для $A^{[2]}$, як і в незвідних середніх вищого порядку, скорочується. Справді, за означенням (18.26),

$A^{[2]}$ можна записати як середнє від квадрата:

$$\begin{aligned} A^{[2]} &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (-i\mathbf{p}\Delta\mathcal{H})^2 \rangle \\ &= -\langle \mathbf{p}\Delta\mathcal{H} \rangle^2 = -p^2\bar{\mathcal{H}}^2, \end{aligned} \quad (22.13)$$

щоб позбавитись громіздкості запису, аргумент у флюктуаційній складовій напруженості магнітного поля опускаємо; ми ввели деякий усереднений масштаб $\bar{\mathcal{H}}$ для характеристики флюктуацій напруженості поля, який будемо вважати також заданим. Отже, оскільки в нас A з (22.8) є уявною величиною, то незвідне середнє $A^{[2]} \leq 0$.

Для простоти розгляду ми не брали до уваги можливе існування в (22.9) перехресних доданків типу $p_x p_y$, пропорційних до добутку різних компонент вектора \mathbf{p} . Це наближення можна обґрунтувати, якщо розподіл за швидкостями, включаючи й мікротурбулентні рухи, є ізотропним і залежить від квадратів швидкостей частинок, а не від квадратів їхніх окремих компонентів. З (22.12) можна зрозуміти також, чому відсутні перехресні ефекти електричного й магнітного полів, про що говорилося вище: такий перехресний ефект пропорційний до середнього від добутку флюктуаційних напруженостей електричного та магнітного полів. Магнітна складова має додаткове усереднення за швидкостями і тому дорівнює нулеві.

Підставмо (22.9) з урахуванням (22.11), (22.13) у формулу (22.7) і після елементарного інтегрування, яке ми вже не один раз виконували, знайдемо функцію розподілу магнітних мікрополів біля середнього поля \mathcal{H}_0 :

$$W(\mathcal{H}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\bar{\mathcal{H}}^3} e^{-(\mathcal{H}-\mathcal{H}_0)^2/2\bar{\mathcal{H}}^2}. \quad (22.14)$$

Тепер ми можемо почати обчислення впливу магнітного поля на коефіцієнт поглинання в лінії. Маючи у своєму розпорядженні функцію $W(\mathcal{H})$, скористаємось такими ж міркуваннями, які привели нас у випадку ефекту Штарка до формул (17.8) та (17.10). У результаті коефіцієнт поглинання в лінії для переходу $|A\rangle \rightarrow |A'\rangle$ з урахуванням ефектів загасання атомних станів

(природної ширини спектральної лінії й ефектів міжчастинкової взаємодії в ударному наближенні), доплерівського розширення (внаслідок теплових та мікротурбулентних рухів) і впливу магнітних полів набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega T}\right) \\ &\times \int d\mathcal{H} W(\mathcal{H}) \rho_{AfA'A}(q) \frac{H(\alpha, v')}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}}, \end{aligned} \quad (22.15)$$

де, згідно з означенням (13.20) та з урахуванням (21.16)–(21.18) і формули (22.2), величина

$$v' = v - \frac{\mu_{BGA'A}\mathcal{H}}{\Delta\omega_D}, \quad (22.16)$$

де

$$v = \frac{\omega - \omega_0 - \Delta}{\Delta\omega_D},$$

$$\alpha = \frac{\gamma}{2\Delta\omega_D}.$$

Інтегрування за компонентами вектора \mathcal{H} у формулі (22.15) відбувається в безмежних межах. Перейдемо до обчислення цього інтеграла:

$$\begin{aligned} &\int d\mathcal{H} W(\mathcal{H}) \frac{H(\alpha, v')}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}} \\ &= \int d\mathcal{H} \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \bar{\mathcal{H}}^3} e^{-(\mathcal{H} - \mathcal{H}_0)^2 / 2\bar{\mathcal{H}}^2} \\ &\times \frac{1}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt e^{-t^2/4 - \alpha t} e^{iv't} \\ &= \frac{1}{\Delta\omega_D \pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt e^{-t^2/4 - \alpha t + ivt} \end{aligned} \quad (22.17)$$

$$\times \int d\mathcal{H} \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \bar{\mathcal{H}}^3} e^{-(\mathcal{H}-\mathcal{H}_0)^2/2\bar{\mathcal{H}}^2} e^{-i\mu_B g_{A'A} \mathcal{H}t/\Delta\omega_D}.$$

Ми використали тут явний вигляд функції $W(\mathcal{H})$ з (22.14) й інтегральне зображення (15.8) для функції Фойгта.

Робимо в (22.17) заміну змінних

$$\mathbf{x} = \frac{\mathcal{H} - \mathcal{H}_0}{\bar{\mathcal{H}}}, \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathbf{x}\bar{\mathcal{H}}, \quad (22.18)$$

$$\bar{\mathcal{H}} = \sqrt{\mathcal{H}_0^2 + 2\mathbf{x}\mathcal{H}_0\bar{\mathcal{H}} + x^2\bar{\mathcal{H}}^2}.$$

Оскільки підінтегральна функція у (22.17) при великих значеннях x швидко згасає, а масштаб флюктуацій магнітного поля $\bar{\mathcal{H}}$ є незначним, то у виразі для \mathcal{H} обмежимося членами, лінійними за $\bar{\mathcal{H}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\simeq \sqrt{\mathcal{H}_0^2 + 2\mathbf{x}\mathcal{H}_0\bar{\mathcal{H}}} = \mathcal{H}_0 \sqrt{1 + 2\frac{\mathbf{x}\mathcal{H}_0}{\mathcal{H}_0^2}\bar{\mathcal{H}}} \\ &\simeq \mathcal{H}_0 + \frac{\mathbf{x}\mathcal{H}_0}{\mathcal{H}_0}\bar{\mathcal{H}}. \end{aligned} \quad (22.19)$$

Тепер потрібний нам інтеграл (22.17) дорівнює:

$$\begin{aligned} &\int d\mathcal{H} W(\mathcal{H}) \frac{H(\alpha, v')}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}} \\ &= \frac{1}{\Delta\omega_D \pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt e^{-t^2/4 - \alpha t + i v t} \\ &\times \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{x} e^{-x^2/2} e^{-i\mu_B g_{A'A} \mathcal{H}_0 t / \Delta\omega_D} \\ &\times \exp\left(-i\mu_B g_{A'A} \bar{\mathcal{H}} t \mathbf{x} \mathcal{H}_0 / \mathcal{H}_0 \Delta\omega_D\right) \quad (22.20) \\ &= \frac{1}{\Delta\omega_D \pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt e^{-t^2/4 - \alpha t + i(v - \mu_B g_{A'A} \mathcal{H}_0 / \Delta\omega_D)t} e^{-(\mu_B g_{A'A} \bar{\mathcal{H}})^2 t^2 / 2\Delta\omega_D^2}. \end{aligned}$$

Зробімо тут заміну змінної інтегрування так, щоб

$$\frac{t^2}{4} + \left(\frac{\mu_B g_{A'A} \bar{\mathcal{H}}}{\Delta \omega_D} \right)^2 \frac{t^2}{2} = \frac{t'^2}{4},$$

тобто

$$t' = t \left[1 + 2 \left(\frac{\mu_B g_{A'A} \bar{\mathcal{H}}}{\Delta \omega_D} \right)^2 \right]^{1/2}.$$

У результаті наш інтеграл знову зводиться до функції Фойґта, але вже з перенормованими величинами α, v та $\Delta \omega_D$:

$$\int d\mathcal{H} W(\mathcal{H}) \frac{H(\alpha, v')}{\Delta \omega_D \sqrt{\pi}} = \frac{H(\bar{\alpha}, \bar{v})}{\overline{\Delta \omega_D} \sqrt{\pi}}, \quad (22.21)$$

де

$$\begin{aligned} \bar{v} &= (\omega - \omega_0 - \Delta - \mu_B g_{A'A} \mathcal{H}_0) / \overline{\Delta \omega_D}, \\ \bar{\alpha} &= \gamma / 2 \overline{\Delta \omega_D}, \end{aligned} \quad (22.22)$$

$$\overline{\Delta \omega_D} = \Delta \omega_D \sqrt{1 + 2 \left(\frac{\mu_B g_{A'A} \bar{\mathcal{H}}}{\Delta \omega_D} \right)^2},$$

або з урахуванням (14.8) новий доплерівський зсув частоти

$$\overline{\Delta \omega_D} = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{2}{M} \left[T + \frac{M v_0^2}{2} + M c^2 \left(\frac{\mu_B g_{A'A} \bar{\mathcal{H}}}{\omega_0} \right)^2 \right]}. \quad (22.23)$$

Остаточно коефіцієнт поглинання в лінії (22.13) з урахуванням магнітних полів дорівнює

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \rho_{AfA'A}(q) \frac{H(\bar{\alpha}, \bar{v})}{\overline{\Delta \omega_D} \sqrt{\pi}}. \quad (22.24)$$

Отже, ми отримали прозорий результат: загальна складова магнітного поля зорі \mathcal{H}_0 спричинює розщеплення спектральних ліній на відстані $\mu_B g_{A'A} \mathcal{H}_0$, а флюктуаційна частина поля $\bar{\mathcal{H}}$

збільшує доплерівську ширину, що ефективно відповідає збільшенню температури на величину $Mc^2(\mu_B g_A' A \hbar / \omega_0)^2$.

Якщо потрібно врахувати й ефект Штарка, то, як і раніше, (див. формулу (17.15)) функцію Фойгта замінюємо на $P(\bar{s}, \bar{\alpha}, \bar{v})$, де в штарківський зсув з (17.17) та (17.18) входить нова доплерівська ширина $\overline{\Delta\omega_D}$.

Отже, дослідження зеєманівського розширення спектральних ліній атомів дозволяє вивчати як глобальні макроскопічні рухи речовини зорі, так і флюктуаційні, турбулентні рухи в її атмосфері.

§ 23. Надтонка структура спектральних ліній

Надтонка структура енергетичного спектра атома, тобто утворення групи близько розташованих енергетичних підрівнів, відстань між якими $\sim 10^3$ разів менша, ніж відстань між рівнями тонкої структури, що формується спін-орбітальною взаємодією, спричинює додаткове розширення спектральних ліній у зоряній атмосфері. Є декілька механізмів утворення надтонкої структури атомних рівнів, які розглянемо по черзі.

По-перше, таке надтонке розщеплення на підрівні та зсув енергетичних рівнів електрона в атомі зумовлені взаємодією магнітного моменту ядра з магнітним полем, яке створює електронна оболонка на ядрі. Це розщеплення залежить від взаємної орієнтації спіну ядра і спіну електрона. Як приклад квантового переходу між підрівнями надтонкої структури можна навести висвічування знаменитої водневої лінії з довжиною хвилі $\lambda \simeq 21$ см.

По-друге, причиною появи надтонкого розщеплення також є взаємодія електричного квадрупольного моменту ядра з градієнтом електричного поля, яке створюють на ядрі заряди, що його оточують, і зокрема власні електрони атома з незаповнених оболонок, орбітальне квантове число яких не дорівнює нулеві. Це явище відоме як ядерний квадрупольний резонанс. Для ядер, спін яких дорівнює нулеві або одній другій, цей ефект відсутній.

Наступний механізм — це ізотопічний ефект, тобто відносний зсув енергетичних рівнів атомів різних ізотопів одного й того ж

хімічного елемента. Пояснення частини ізотопічного ефекту дає теорія Бора. Як відомо, у формулу Бора для енергетичних рівнів атома входить не маса електрона m , а його приведена маса, обернена величина якої дорівнює сумі обернених величин мас електрона та ядра. Звідси відносний зсув енергії $\Delta E/E = m\Delta M/M^2$, де M — маса ядра, ΔM — різниця мас ядер ізотопів. Однак цей зсув швидко маліє з ростом маси ядра. У спектрах багатоелектронних атомів реалізується ще один тип ізотопічного зсуву енергетичних рівнів атома (його називають ще специфічним ізотопічним ефектом), зумовлений обмінними ефектами, тобто квантовомеханічним принципом тотожності частинок. Нарешті потрібно брати до уваги також скінченність розмірів ядер, які є неоднаковими для різних ізотопів.

Отже, під дією цих механізмів відбувається зсув та розщеплення енергетичних рівнів атома, і як результат виникає низка близьких ліній, які, внаслідок різного типу збурень, можуть перекриватись і утворювати спектральну лінію певної ширини. Для виявлення розширення спектральної лінії за надтонким механізмом потрібно в кожному конкретному випадку проводити детальний аналіз.

Наприклад, якщо атомне ядро має спін не рівний нулеві, то спектральна лінія такого атома є розширеною порівняно з ізотопом, спін якого дорівнює нулеві. Якщо спін більший, ніж $1/2$, то “вмикається” ще механізм ядерного квадрупольного резонансу. Тому в цих випадках маємо додаткове розширення спектральних ліній. При цьому ширина смуги, у яку розмивається відповідний атомний рівень, а отже, і відповідні спектральні лінії, є порядку відстаней між крайніми рівнями надтонкої структури.

Як урахувати вплив надтонкої структури енергетичного спектра атома на профіль його зоряних спектральних ліній? Маючи з попереднього параграфу досвід наближеного розрахунку впливу магнітного поля зір на ширину спектральних ліній, а також наближене обчислення функції розподілу електричних мікрополів у § 18, ми можемо тим самим методом урахувати внесок і надтонкої структури енергетичних рівнів атома в розширення ліній.

Отже, подібно до (17.11) або до (22.5) за допомогою дельта-функції вводимо відповідну функцію розподілу для нашого випадку, причому в цьому означенні кутові дужки будуть позначати усереднення за початковими станами компонент надтонкої структури енергетичних рівнів атома та підсумовування за квантовими числами кінцевих станів. Мова йде про квантові числа підрівнів надтонкої структури, виділених із сукупності квантових чисел A, A' , за якими йде підсумовування в означенні коефіцієнта поглинання $\kappa(q)$. Усереднення за початковими станами зводиться до підсумовування за квантовими числами підрівнів початкових станів та ділення цієї суми на кількість підрівнів. Обмежимось у функції розподілу для надтонкої структури, знову ж таки як і у (18.25) та (22.9), лише незвідними середніми другого порядку і приходимо до її гауссівського характеру типу (18.36) для електричних полів чи (22.14) для магнітних полів. У випадку квадрупольної взаємодії необхідно також пам'ятати, що "центр ваги" надтонкої структури зміщується, а це приведе до незначного зміщення основної частоти ω_0 .

Згортка знайденої таким чином функції розподілу з профілем коефіцієнта поглинання, що не враховує надтонку структуру, дасть, аналогічно до (22.22), додаткове розширення спектральної лінії через збільшення доплерівської ширини $\Delta\omega_D$:

$$\Delta\omega_D \rightarrow \Delta\omega_D \sqrt{1 + 2 \left(\frac{\Delta\omega^{\text{SF}}}{\Delta\omega_D} \right)^2}, \quad (23.1)$$

де $\Delta\omega^{\text{SF}}$ — дисперсія функції розподілу надтонкої структури, яка в частотній шкалі за порядком величини дорівнює сумі відстаней між крайніми підрівнями верхнього та нижнього атомних рівнів, переходу між якими утворюють спектральну лінію на частоті ω_0 .

Отже, результируючий ефект від урахування надтонкої структури енергетичних рівнів атома зводиться, як це вже було і при врахуванні мікротурбулентних рухів в атмосфері зорі (формула (14.6)) і для флюктуаційних магнітних полів (формула (22.23)), до того, що ефективну температуру T^* у виразі для коефіцієнта

поглинання потрібно, згідно з (23.1), збільшити:

$$T^* \rightarrow T^* \left[1 + 2 \left(\frac{\Delta\omega^{\text{SF}}}{\Delta\omega_D} \right)^2 \right] = T^* + Mc^2 \left(\frac{\Delta\omega^{\text{SF}}}{\omega_0} \right)^2. \quad (23.2)$$

Ми не наводимо деталей цих розрахунків, щоб не втомлювати Читача, оскільки вони з точністю до позначень “слово в слово” повторюють наші попередні обчислення, на які ми посилаємося.

Прецизійні дослідження контурів спектральних ліній, зокрема з метою виявлення впливу на них механізмів надтонкого розщеплення енергетичних рівнів атома, передбачає високу точність експериментальних значень розподілу за частотами інтенсивності випромінювання, яке залишає поверхню зорі і потрапляє в спектрограф. Ми не обговорювали цього питання, вважаючи, що предметом нашого дослідження є справжні профілі ліній, не спотворені приладами, які їх реєструють. Відтворення цього справжнього профілю спектральної лінії з того, що дає реєструючий прилад, є непростю задачею.

Спектрограф розмиває безмежно вузьку дельта-подібну лінію в профіль, який називають інструментальним контуром, або апаратною функцією. Ця величина є характеристикою приладу і дуже часто її моделюють гауссівською кривою. Вимірний профіль є згорткою апаратної функції з істинним профілем спектральної лінії. Формально це рівняння збігається з рівнянням (14.10) для спостережуваного профілю $\langle I_{k,\alpha} \rangle$, що є результатом спотворення справжнього профілю $I_{k,\alpha}$ функцією розподілу макротурбулентних швидкостей w_{mac} зі спектральною функцією $P(\omega)$ з (14.15), яка в цьому випадку і грає роль апаратної функції.

Математична процедура вилучення справжнього профілю належить до так званих некоректних задач. Важливим, однак, є те, що, подібно до макротурбулентних рухів, спектрограф не змінює еквівалентних ширин спектральних ліній W_{λ_0} (див. рівняння (14.20)) і отже не може впливати на результати аналізу фізичних процесів у зоряній атмосфері, якщо цей аналіз ґрунтується на дослідженні величини W_{λ_0} .

РОЗДІЛ IV

СИЛИ ОСЦИЛЯТОРА

§ 24. Правило сум для сил осцилятора

Сила осцилятора — основна величина, що входить у всі вирази теорії взаємодії випромінювання з речовиною. Вона визначає ймовірність квантового переходу з одного стану в інший з поглинанням фотона, і отже, є однією з головних величин, від яких залежить коефіцієнт поглинання. Тут нас цікавитиме коефіцієнт поглинання у спектральній лінії. Тому ми зосередимо увагу на силах осцилятора деяких модельних атомних систем.

Насамперед доведемо в загальному випадку так зване правило сум для сил осцилятора. Виходимо з означення (11.7), перепозначуємо індекси станів і розписуємо матричний елемент радіус-вектора:

$$f_{A'A} = \frac{2m\omega_{A'A}}{3\hbar} (|x_{A'A}|^2 + |y_{A'A}|^2 + |z_{A'A}|^2). \quad (24.1)$$

Наголошуємо, що ми визначаємо силу осцилятора так, щоб вона була додатною величиною для процесу поглинання фотона: $f_{A'A} = -f_{AA'} \geq 0$. Для зручності розгляньмо одновимірний випадок, коли

$$f_{A'A} = \frac{2m\omega_{A'A}}{\hbar} |x_{A'A}|^2. \quad (24.2)$$

Підсумуймо цей вираз за першим індексом A' і виконаймо низку простих перетворень:

$$\begin{aligned}
\sum_{A'} f_{A'A} &= \frac{2m}{\hbar} \sum_{A'} \omega_{A'A} x_{A'A} x_{AA'} \\
&= \frac{m}{\hbar} \sum_{A'} (\omega_{A'A} x_{A'A} x_{AA'} - \omega_{AA'} x_{AA'} x_{A'A}) \\
&= \frac{m}{\hbar} \sum_{A'} \left(\frac{p_{A'A}}{im} x_{AA'} - \frac{p_{AA'}}{im} x_{A'A} \right) \quad (24.3) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \sum_{A'} (x_{AA'} p_{A'A} - p_{AA'} x_{A'A}) \\
&= \frac{1}{i\hbar} (x\hat{p} - \hat{p}x)_{AA} = 1.
\end{aligned}$$

Ми використали тут рівняння руху Гайзенберґа: x -компонента оператора імпульсу \hat{p} в матричній формі

$$p_{A'A} = m\dot{x}_{A'A} = m i \omega_{A'A} x_{A'A}$$

(крапкою позначена похідна за часом), а також переставні співвідношення між операторами координати та імпульсу.

Отже, ми знайшли правило сум, відоме також як теорема Томаса–Райхе–Куна¹ для сил осцилятора:

$$\sum_{A'} f_{A'A} = 1. \quad (24.4)$$

Звертаємо увагу, що це співвідношення є точним. Для його одержання ми не використовували жодних наближень.

Якщо маємо тривимірний випадок, то кожен із вимірів у $f_{A'A}$ дає при підсумовуванні за A' одиницю, у результаті правило сум залишається незмінним і має вигляд (24.4).

¹Вернер Кун (1899–1963) — швейцарський фізик і хімік; у 1925 році опублікував правило сум для сил осцилятора, яке пізніше в тому ж році знайшли В. Томас і Ф. Райхе.

Якщо сила осцилятора береться не для одного, а для Z електронів атома, то легко бачити, що

$$\sum_{A'} f_{A'A} = Z. \quad (24.5)$$

Коли квантові числа A', A набувають як дискретних, так і неперервних значень, то під сумою за A' у виразах (24.4), (24.5) розуміємо підсумовування за всіма дискретними значеннями A' й інтегрування за всім неперервним інтервалом можливих значень A' .

При наближених обчисленнях сил осциляторів або їх експериментальних вимірюваннях правило сум (24.4) виступає як важливий критерій перевірки правильності одержаних результатів для $f_{A'A}$. Пізніше ми зупинятимемось на цьому питанні.

§ 25. Сила осцилятора для лінійного гармонічного осцилятора

Лінійний гармонічний осцилятор є однією з найпростіших моделей атомної системи. Обчислимо для цієї моделі сили осцилятора, використовуючи хвильові функції в координатному x -зображенні, нумеруючи їх цілим квантовим числом $A = n$ [8]:

$$|A\rangle = |n\rangle = (2^n n! \sqrt{\pi} l_0)^{-1/2} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (25.1)$$

де знерозмірена координата

$$\xi = x/l_0, \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

— квантова амплітуда коливань; m , ω — маса й частота осцилятора. Поліном Ерміта

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}, \quad (25.2)$$

енергетичні рівні осцилятора

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (25.3)$$

квантове число $n = 0, 1, 2, \dots$

За означенням сила осцилятора

$$f_{n'n} = \frac{2m\omega_{n'n}}{\hbar} |x_{n'n}|^2, \quad (25.4)$$

де частота переходу

$$\omega_{n'n} = \frac{E_{n'} - E_n}{\hbar} = \omega(n' - n). \quad (25.5)$$

Нам потрібно обчислити матричний елемент координати:

$$x_{n'n} = l_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{H_{n'}(\xi)}{\sqrt{2^{n'} n'! \sqrt{\pi}}} \xi \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} d\xi. \quad (25.6)$$

Використаймо добре відоме рекурентне співвідношення для поліномів Ерміта

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi) \quad (25.7)$$

і запишімо матричний елемент так:

$$\begin{aligned} x_{n'n} &= l_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{H_{n'}(\xi)}{\sqrt{2^{n'} n'! \sqrt{\pi}}} \left\{ \frac{1}{2} \frac{H_{n+1}(\xi)}{\sqrt{2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi}}} \sqrt{2(n+1)} \right. \\ &+ \left. n \frac{H_{n-1}(\xi)}{\sqrt{2^{n-1} (n-1)! \sqrt{\pi}}} \sqrt{\frac{1}{2n}} \right\} d\xi \\ &= l_0 \left\{ \sqrt{\frac{(n+1)}{2}} \delta_{n', n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n', n-1} \right\}. \end{aligned} \quad (25.8)$$

Ми скористались тут умовою ортонормованості хвильових функцій гармонічного осцилятора

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n'n} \quad (25.9)$$

або в розгорнутому вигляді:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{H_{n'}(\xi)}{\sqrt{2^{n'} n'! \sqrt{\pi}}} \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} d\xi = \delta_{n'n}. \quad (25.10)$$

Підставляємо вираз для $x_{n'n}$ в означення (24.2) і, беручи до уваги, що перехресні доданки при піднесенні $x_{n'n}$ до квадрата через несумісність умов на квантові числа дають нульовий внесок, знаходимо²

$$f_{n'n} = \frac{2m}{\hbar} l_0^2 \left\{ \frac{n+1}{2} \omega_{n+1,n} \delta_{n',n+1} + \frac{n}{2} \omega_{n-1,n} \delta_{n',n-1} \right\} \quad (25.11)$$

або остаточно:

$$f_{n'n} = (n+1) \delta_{n',n+1} - n \delta_{n',n-1}. \quad (25.12)$$

Легко пересвідчитись, що правило сум виконується:

$$\sum_{n'} f_{n'n} = (n+1) - n = 1. \quad (25.13)$$

Зокрема для переходу з основного стану в перший збуджений $f_{10} = 1$. Слід зауважити, що в § 11 при оцінці природної ширини спектральної лінії ми отримали для сили осцилятора просторового гармонічного осцилятора між цими станами значення $1/3$. Тут немає непорозумінь, оскільки ми розглядали просторовий осцилятор з означенням (24.1) для сили осцилятора і вважали, що коливання відбуваються вздовж осі x , а матричні елементи координат y та z дорівнюють нулеві.

²Це значення матричного елемента координати x між першим збудженим ($n' = 1$) і основним ($n = 0$) станами ми використали в § 11 при порівнянні класичного і квантового виразів для природної ширини спектральної лінії.

§ 26. Сили осцилятора водневоподібних атомів. Серія Лаймана

У цьому параграфі ми розрахуємо сили осцилятора для переходу з основного стану атома водню в будь-який збуджений. Такі переходи відповідають серії спектральних ліній Лаймана³. Формули, які ми отримаємо, будуть мати силу і для іонів He^+ , Li^{++} та подібних до них, а також для водневоподібних атомів, у яких рух оптичного електрона можна розглядати як рух в ефективному центральному полі кулонівського типу. У всякому разі, ці формули можна використовувати для одержання прикидних оцінок сил осциляторів інших атомів.

Почнемо з того, що пригадаємо сукупність квантових чисел, які визначають стан атома водню. Отже маємо: $A = (n, l, m)$, $A' = (n', l', m')$, де $n = 1, 2, \dots$ — головне квантове число, $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$ — орбітальне квантове число, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ — магнітне квантове число. Хвильові функції

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (26.1)$$

де r, θ, φ — сферичні координати електрона в атомі, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферична функція, $R_{nl}(r)$ — радіальна хвильова функція. Явні вирази цих функцій випишемо нижче.

З курсу квантової механіки [8] пригадаймо також правила відбору для дипольних переходів. Такі переходи можливі лише при зміні орбітального квантового числа l на одиницю: $l' = l \pm 1$ і $l' = 1$ при $l = 0$. Відповідно для магнітного квантового числа ці правила дають $m' - m = 0, \pm 1$. Тому перехід з основного стану, коли $n = 1, l = 0, m = 0$, можливий лише у стан з $l' = 1$ при довільному значенні числа n' . Згідно зі стандартними позначеннями, основний стан записуємо скорочено як $|1s\rangle$, а стан з довільним n і $l = 1$ — як $|np\rangle$. Отже, нас цікавитиме перехід $|1s\rangle \rightarrow |np\rangle$, оскільки інші переходи заборонені.

³Теодор Лайман (1874–1954) — американський фізик-експериментатор. 1914 року відкрив спектральну серію в ультрафіолетовій частині спектра водню.

У формулі для коефіцієнта поглинання $\kappa(q)$, унаслідок виродження станів водневоподібних атомів, підсумовування за магнітним квантовим числом стосується лише сил осцилятора. Тому доцільно розглядати для них уже заздалегідь підсумовані за m вирази:

$$f_{np,1s} = \sum_{m=0,\pm 1} f_{n1m,100} = \frac{2m\omega_{n,1}}{3\hbar} \quad (26.2)$$

$$\times \sum_{m=0,\pm 1} \left(|x_{n1m,100}|^2 + |y_{n1m,100}|^2 + |z_{n1m,100}|^2 \right),$$

де частота переходу

$$\omega_{n,1} = \frac{E_n - E_1}{\hbar} = \frac{Ze^2}{2a_B} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right), \quad (26.3)$$

терм

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2a_B n^2}, \quad (26.4)$$

$a_B = \hbar^2/me^2$ — радіус Бора, Z — заряд ядра. Решта позначень зрозумілі без пояснень.

Запишімо матричні елементи декартових координат через сферичні координати:

$$\begin{cases} x_{n1m,100} = (r \sin \theta \cos \theta)_{n1m,100} = r_{n1,10} (\sin \theta \cos \varphi)_{1m,00}, \\ y_{n1m,100} = r_{n1,10} (\sin \theta \sin \varphi)_{1m,00}, \\ z_{n1m,100} = r_{n1,10} (\cos \theta)_{1m,00}. \end{cases}$$

Позначення тут також очевидні, тому не зупиняємось на їх поясненні. Для того, щоб просунутись далі, обчислюємо спочатку кутові множники в матричних елементах, використовуючи явні вирази для потрібних тут (тобто з $m = 0, \pm 1$) сферичних функцій [8]:

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (26.5)$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad (26.6)$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta. \quad (26.7)$$

Отже, (для зручності тимчасово вводимо в індексах знак “;”)

$$(\sin \theta \cos \varphi)_{10;00} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = 0,$$

інтеграл за θ дорівнює нулеві, як і інтеграл за φ .

Далі

$$(\sin \theta \cos \varphi)_{1,\pm 1;00} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (\mp) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \sin \varphi$$

$$\times \cos \varphi \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{2} \times (\mp) \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{4}{3} = \mp \frac{1}{\sqrt{6}},$$

$$(\sin \theta \sin \varphi)_{10;00} = 0,$$

$$(\sin \theta \sin \varphi)_{1,\pm 1;00} = \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{2\pi} e^{\pm i\varphi} \sin \varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (\mp) \sqrt{\frac{3}{8}} \sin \theta \sin \theta$$

$$= (\mp) \frac{1}{2i} \times (\mp) \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{4}{3} = \frac{1}{i\sqrt{6}},$$

$$(\cos \theta)_{10;00} = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \sqrt{\frac{3}{4}} \cos^2 \theta = 1 \times \sqrt{\frac{3}{4}} \frac{2}{3} = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Використовуючи знайдені кутові частини матричних елементів, з виразу (26.2) знаходимо

$$\begin{aligned} f_{np,1s} &= \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,1}}{\hbar} |r_{n1,10}|^2 \left\{ \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{6} \right) + \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{6} \right) + \frac{1}{3} \right\} \\ &= \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,1}}{\hbar} |r_{n1,10}|^2, \end{aligned} \quad (26.8)$$

де радіальна частина матричних елементів координат

$$r_{n1,10} = \int_0^\infty r^2 R_{n1}(r) r R_{10}(r) dr. \quad (26.9)$$

Для обчислення цього інтеграла випишімо з [8] радіальну хвильову функцію електрона в атомі водню:

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= -\sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4[(n+l)!]^3}} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} \\ &\times \left(\frac{2\rho}{n} \right)^l e^{-\rho/n} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2\rho}{n} \right), \end{aligned} \quad (26.10)$$

де знерозмірена радіальна координата

$$\rho = r / \left(\frac{a_B}{Z} \right),$$

$L_{n+l}^{2l+1}(x)$ — приєднаний поліном Лагерра,

$$L_k^s(x) = \left(\frac{d}{dx} \right)^s L_k(x), \quad L_k(x) = e^x \left(\frac{d}{dk} \right)^k e^{-x} x^k.$$

Тепер

$$r_{n1,10} = \frac{a_B}{Z} \sqrt{\frac{4(n-2)!}{n^4[(n+1)!]^3}} 2 \int_0^\infty \rho^3 d\rho \left(\frac{2\rho}{n} \right) e^{-\rho/n}$$

$$\begin{aligned}
& \times L_{n+1}^3(2\rho/n)e^{-\rho} = \frac{a_B}{Z} \sqrt{\frac{4(n-2)!}{n^4[(n+1)]^3}} 2 \\
& \times \left(\frac{n}{2}\right)^4 \int_0^\infty x^4 L_{n+1}^3(x) e^{-\frac{n+1}{2}x} L_1^1(x) dx. \quad (26.11)
\end{aligned}$$

Оскільки $L_1^1(x) = -1$, то нам залишилось обчислити такий інтеграл:

$$I(\alpha) = \int_0^\infty x^4 L_{n+1}^3(x) e^{-\alpha x} dx,$$

після чого шуканий матричний елемент

$$r_{n1,10} = -\frac{a_B}{Z} \sqrt{\frac{4(n-2)!}{n^4[(n+1)!]^3}} 2 \left(\frac{n}{2}\right)^4 I(\alpha) \Big|_{\alpha=\frac{n+1}{2}}. \quad (26.12)$$

Перейдімо до обчислення інтеграла:

$$\begin{aligned}
I(\alpha) &= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \int_0^\infty L_{n+1}^3(x) e^{-\alpha x} dx \\
&= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \int_0^\infty \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^3 L_{n+1}(x)\right] e^{-\alpha x} dx \\
&= (\text{тричі інтегруємо частинами}) \\
&= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \left\{ \int_0^\infty L_{n+1}(x) \left(-\frac{d}{dx}\right)^3 e^{-\alpha x} dx \right. \\
&\quad \left. + (\text{проінтегровані члени, що зникають при диференціюванні за параметром } \alpha) \right\}
\end{aligned}$$

$$= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \alpha^3 \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} L_{n+1}(x) dx. \quad (26.13)$$

Використаймо тепер явний вигляд для полінома Лагерра:

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \alpha^3 \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1} e^{-x} x^{n+1} dx \\ &= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \alpha^3 \int_0^{\infty} e^{-(\alpha-1)x} \left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1} e^{-x} x^{n+1} dx. \end{aligned} \quad (26.14)$$

Інтегруємо частинами $(n+1)$ раз, проінтегровані члени дають нульовий внесок на верхній межі — від експоненти, а на нижній — від множника x^{n+1} .

У результаті “перекидаємо” дію похідних за x під інтегралом наліво і зводимо інтеграл до Γ -функції:

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \alpha^3 \int_0^{\infty} e^{-x} x^{n+1} \left(-\frac{d}{dx}\right)^{n+1} e^{-(\alpha-1)x} dx \\ &= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \alpha^3 (\alpha-1)^{n+1} \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} x^{n+1} dx \\ &= \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \alpha^3 (\alpha-1)^{n+1} \frac{1}{\alpha^{n+2}} \Gamma(n+2). \end{aligned} \quad (26.15)$$

Таким чином, оскільки $\Gamma(n+2) = (n+1)!$, нам залишилось узяти лише похідні за α :

$$I(\alpha) = (n+1)! \left(\frac{d}{d\alpha}\right)^4 \frac{(\alpha-1)^{n+1}}{\alpha^{n-1}} \quad (26.16)$$

і остаточно:

$$I(\alpha) = \frac{[(n+1)!]^2}{(n-2)!} (n+2-4\alpha) \frac{(\alpha-1)^{n-3}}{\alpha^{n+3}},$$

$$\alpha = \frac{n+1}{2}.$$

Або в явному вигляді наш інтеграл

$$I\left(\frac{n+1}{2}\right) = -n \frac{[(n+1)!]^2 (n-1)^{n-3}}{(n-2)! (n+1)^{n+3}} 2^6. \quad (26.17)$$

Отже, матричний елемент

$$\begin{aligned} r_{n1,10} &= \frac{a_B}{Z} n^5 \frac{[(n+1)!]^2 (n-1)^{n-3}}{(n-2)! (n+1)^{n+3}} 2^3 \sqrt{\frac{4(n-2)!}{n^4 [(n+1)!]^3}} \\ &= 2^4 \frac{a_B}{Z} n^3 \frac{(n-1)^{n-3}}{(n+1)^{n+3}} \sqrt{\frac{(n+1)!}{(n-2)!}} \\ &= 2^4 \frac{a_B}{Z} n^3 \sqrt{\frac{(n-1)^{2n-6} n(n-1)(n+1)}{(n+1)^{2n+6}}}. \end{aligned} \quad (26.18)$$

Остаточно

$$r_{n1,10} = 2^4 \frac{a_B}{Z} \sqrt{\frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}} n^7. \quad (26.19)$$

Тепер ми можемо виписати силу осцилятора:

$$\begin{aligned} f_{np,1s} &= \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n1}}{\hbar} |r_{n1,10}|^2 = \frac{2}{3} \frac{m}{\hbar^2} \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \\ &\times 2^8 \frac{a_B^2}{Z^2} (n-1)^{2n-5} \frac{n^7}{(n+1)^{2n+5}}. \end{aligned} \quad (26.20)$$

Остаточно знаходимо

$$f_{1s \rightarrow np} = f_{np,1s} = \frac{2^8}{3} n^5 \frac{(n-1)^{2n-4}}{(n+1)^{2n+4}}. \quad (26.21)$$

Ми використали тут часто вживане позначення $f_{1s \rightarrow np}$ для сили осцилятора, яке вказує на напрямок квантового переходу з поглинанням фотона (див. виноску на с. 135). У подальшому викладі будемо вживати обидва ці позначення як рівноправні, турбуючись лише про зручність запису формул.

Із формули (26.21), зокрема, знаходимо чисельні значення сил осцилятора:

для лінії L_α

$$f_{2p,1s} = 16 \left(\frac{2}{3} \right)^9 = 0.416197,$$

для лінії L_β

$$f_{3p,1s} = \frac{3^4}{2^{10}} = 0.079102.$$

Цікаво, що при великих значеннях головного квантового числа n сила осцилятора $\sim 1/n^3$:

$$f_{1s \rightarrow np} \underset{n \rightarrow \infty}{=} \frac{2^8}{3n^3} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(1 - 1/n)^{2n}}{(1 + 1/n)^{2n} (1 - 1/n^2)^n} = \frac{2^8}{3e^4 n^3}, \quad (26.22)$$

де e — основа натуральних логарифмів.

Для перевірки правила сум здійснимо за допомогою комп'ютера підсумовування виразу (26.21) за всіма значеннями головного квантового числа n . Цим ми обчислимо суму за всіма квантовими числами кінцевого стану, оскільки орбітальне квантове число приймає лише одне значення $l = 1$, а підсумовування за магнітним квантовим числом ми виконали у формулах (26.2), (26.8):

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} f_{np,1s} &= \frac{2^8}{3} \sum_{n=2}^{\infty} n^5 \frac{(n-1)^{2n-4}}{(n+1)^{2n+4}} \\ &= \frac{2^8}{3} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(1-1/n)^{2n-4}}{n^3 (1+1/n)^{2n+4}} = 0.565004. \quad (26.23) \end{aligned}$$

Для того щоб виконувалось правило сум (24.4), до одиниці не вистачає ще значення $(1 - 0.565004) = 0.434996$. Цей внесок дасть неперервний спектр, про що буде йти мова пізніше при дослідженні коефіцієнта неперервного поглинання.

§ 27. Сили осцилятора для серії Бальмера

Переходимо тепер до обчислень сил осцилятора спектральної серії Бальмера⁴, тобто беремо до уваги квантові переходи електрона у водневоподібному атомі з першого збудженого стану ($n = 2$) на вищі стани. У попередньому параграфі ми докладно провели розрахунки сили осцилятора лайманівської серії. Тому тут опускаємо всі деталі обчислень, оскільки вони аналогічні до попередніх і фактично вимагають лише повторення тих самих міркувань та арифметичних вправ.

Випишемо відмінні від нуля сили осцилятора:

$$f_{np,2s} = \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,2}}{\hbar} \sum_{m=0,\pm 1} |\langle n, 1, m | \mathbf{r} | 2, 0, 0 \rangle|^2,$$

$$f_{nd,2p} = \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,2}}{\hbar} \sum_{m,m'} |\langle n, 2, m | \mathbf{r} | 2, 1, m' \rangle|^2, \\ (m'=0,\pm 1; m=0,\pm 1, \pm 2)$$

$$f_{ns,2p} = \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,2}}{\hbar} \sum_{m'=0,\pm 1} |\langle n, 0, 0 | \mathbf{r} | 2, 1, m' \rangle|^2.$$

Суми за m та m' легко обчислюються подібно до попередніх розрахунків, виконаних для серії Лаймана. Загалом

$$\sum_{m,m'} |\langle n', l', m' | \mathbf{r} | n, l, m \rangle|^2 = |r_{n',l\pm 1;n,l}|^2 \frac{(l + 1/2 \pm 1/2)}{2l + 1}. \quad (27.1)$$

У нашому випадку маємо:

$$f_{np,2s} = \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,2}}{\hbar} |r_{n1,20}|^2, \\ f_{nd,2p} = \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,2}}{\hbar} \frac{2}{3} |r_{n2,21}|^2, \\ f_{ns,2p} = \frac{2}{3} \frac{m\omega_{n,2}}{\hbar} \frac{1}{3} |r_{n0,21}|^2. \quad (27.2)$$

⁴Бальмер Йоган Якоб (1825–1898) — швейцарський фізик і математик. У 1885 році виявив закономірність у спектральних лініях атома водню.

Матричні елементи також розраховуються аналогічно до попереднього (див. також [24, 25]):

$$\begin{aligned}
 |r_{n1,20}|^2 &= 2^{17} n^7 (n^2 - 1) \frac{(n-2)^{2n-6}}{(n+2)^{2n+6}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2, \\
 |r_{n2,21}|^2 &= \frac{2^{19}}{3} n^9 (n^2 - 1) \frac{(n-2)^{2n-7}}{(n+2)^{2n+7}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2, \\
 |r_{n0,21}|^2 &= \frac{2^{15}}{3} n^9 \frac{(n-2)^{2n-6}}{(n+2)^{2n+6}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2.
 \end{aligned} \tag{27.3}$$

Сили осцилятора:

$$\begin{aligned}
 f_{2s \rightarrow np} &= \frac{2^{15}}{3} n^5 (n^2 - 1) \frac{(n-2)^{2n-5}}{(n+2)^{2n+5}}, \\
 f_{2p \rightarrow nd} &= \frac{2^{18}}{3^3} n^7 (n^2 - 1) \frac{(n-2)^{2n-6}}{(n+2)^{2n+6}}, \\
 f_{2p \rightarrow ns} &= \frac{2^{13}}{3^3} n^7 \frac{(n-2)^{2n-5}}{(n+2)^{2n+5}}.
 \end{aligned} \tag{27.4}$$

Наведемо деякі чисельні приклади, користуючись назвами з теорії спектральних серій:
для головної серії

$$f_{2s \rightarrow 3p} = \left(\frac{4}{5}\right)^9 \left(\frac{9}{5}\right)^2 = 0.434865,$$

для першої бічної серії

$$f_{2p \rightarrow 3d} = \frac{8}{5} f_{2s \rightarrow 3p} = 2 \left(\frac{4}{5}\right)^{10} \left(\frac{9}{5}\right)^2 = 0.695785,$$

для другої бічної серії

$$f_{2p \rightarrow 3s} = \frac{1}{32} f_{2s \rightarrow 3p} = 16 \left(\frac{2}{5}\right)^9 \left(\frac{9}{5}\right)^2 = 0.013589.$$

Цікаво також знайти їхні асимптотичні значення при $n \rightarrow \infty$:

$$f_{2s \rightarrow np} = \frac{2^{15}}{3n^3} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(1 - 2/n)^{2n}}{(1 + 2/n)^{2n}} = \frac{2^{15}}{3n^3} e^{-8}, \quad (27.5)$$

тут e — основа натуральних логарифмів. Аналогічно знаходимо асимптотики для решти сил осциляторів:

$$\begin{aligned} f_{2s \rightarrow np} &= \left(\frac{4}{e}\right)^8 \frac{1}{6n^3}, \\ f_{2p \rightarrow nd} &= \left(\frac{4}{e}\right)^8 \frac{4}{27n^3}, \\ f_{2p \rightarrow ns} &= \left(\frac{4}{e}\right)^8 \frac{1}{216n^3}. \end{aligned} \quad (27.6)$$

Так що відношення сил осциляторів у цій межі дорівнюють:

$$\frac{f_{2s \rightarrow np}}{f_{2p \rightarrow nd}} \underset{n \rightarrow \infty}{=} \frac{9}{8},$$

а

$$\frac{f_{2p \rightarrow nd}}{f_{2p \rightarrow ns}} \underset{n \rightarrow \infty}{=} 32.$$

Числові значення сил осциляторів для інших спектральних серій атома водню подано в [25]. У [30] наведено таблицю сил осциляторів також і для інших атомів.

§ 28. Квазікласичне наближення для сил осцилятора

Повчально дослідити сили осцилятора у квазікласичному наближенні, що відповідає, як відомо, великим значенням квантових чисел. Такий розгляд важливий ще й тому, що він дозволяє отримати не лише якісні, але в деяких випадках і кількісні результати, які можна використовувати в реальних задачах.

Отже, як ми бачили в попередніх параграфах, сили осцилятора $f_{n'n}$ при великих значеннях головного квантового числа n'

зменшуються за законом $1/n'^3$ (див. (26.22), (27.5), (27.6)). Оскільки сили осцилятора при переставлянні їхніх індексів місцями змінюють лише знак $f_{n'n} = -f_{nn'}$, то зрозуміло, що і при великих значеннях числа n $f_{n'n} \sim 1/n^3$. Тобто можна стверджувати, що при $n \rightarrow \infty$ і $n' \rightarrow \infty$ величина $f_{n'n} \sim 1/(nn')^3$. Сили осцилятора $f_{n'n}$ залежать також від частоти переходу $\omega_{n'n} = \omega_c(1/n^2 - 1/n'^2)$, $\omega_c = Z^2 e^2 / 2\hbar a_B$ — частота, що відповідає енергії йонізації атома. Як ми покажемо пізніше, ця залежність при великих частотах також є “оберненим кубом”: $\sim 1/\omega_{n'n}^3$. Таким чином, припускаємо, що для великих квантових чисел сила осцилятора

$$f_{n'n} = \text{const} \times \left(\frac{\omega_c}{\omega_{n'n}} \right)^3 \frac{1}{n'^3 n^3}, \quad (28.1)$$

причому ми очікуємо, що стала величина, яку ми позначили як const , є порядку одиниці⁵.

Строгий квазікласичний розрахунок, якого ми не маємо змоги тут розгортати, дає для нашої сталої таке значення [25, 26]:

$$\text{const} = \frac{32}{3\pi\sqrt{3}} \simeq 1.9602805. \quad (28.2)$$

Отже, квазікласичне наближення для сил осцилятора дає такий результат:

$$f_{n'n} = \frac{32}{3\pi\sqrt{3}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n'^3 n^3}, \quad n', n \rightarrow \infty. \quad (28.3)$$

Цей вираз є лише ведучим членом розкладу при $n', n \rightarrow \infty$. За потреби точнішого значення для $f_{n'n}$ праву частину виразу

⁵Це добре відомий факт “із побуту” кожного фізика-теоретика, що використовував для розв’язку різних фізичних задач, і не лише шкільного типу, метод розмірностей, якщо працювати у природних одиницях виміру. Наприклад, для періодичних процесів потрібно використовувати циклічну частоту ω , а не лінійну — $\nu = \omega/2\pi$. Так знаходимо період математичного чи пружного маятника, або третій закон Кеплера, — стала величина в цих співвідношеннях просто дорівнює одиниці. У багатьох інших задачах вона також одного порядку з одиницею. Не зраджує нас такий підхід і в цьому випадку.

(28.1) беруть з деяким множником, так званим фактором Гаунта $g(n', n)$:

$$f_{n'n} = g(n', n) \frac{32}{3\pi\sqrt{3}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n'^3 n^3}. \quad (28.4)$$

Для фактора Гаунта існують різні апроксимаційні вирази, які ми тут не наводимо (див. [15], [30]). У видимій ділянці спектра фактор Гаунта:

$$g(n', n) \simeq 1. \quad (28.5)$$

У нас є ще одна можливість знайти сталу величину в рівнянні (28.1), яка може бути яскравою ілюстрацією використання правила сум (24.4). А саме, будемо вимагати, щоб сума за n' від точного виразу $f_{n'n}$, тобто внесок у правило сум від дискретного спектра, збігалась із цією сумою від наближеного виразу (28.1):

$$\sum_{n'} f_{n'n} = \text{const} \sum_{n'} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n'^3 n^3}. \quad (28.6)$$

Підсумовування у правій частині цієї рівності легко здійснюється, а ліва частина (28.6) нам відома. Звідси й обчислюємо значення const , яке, зрозуміло, залежатиме, як і фактор Гаунта, від n . Пізніше, коли будемо досліджувати коефіцієнт поглинання в неперервному спектрі, ми здійснимо аналітичне продовження квазікласичного виразу для $f_{n'n}$ на неперервний спектр і знайдемо const із використанням правила сум у повному обсязі. А тепер нам потрібно відшукати

$$\begin{aligned} & \sum_{n'=n+1}^{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n'^3 n^3} \\ &= \sum_{n'=n+1}^{\infty} \left(\frac{n'n}{n'^2 - n^2} \right)^3 = \frac{n^3}{8} \sum_{n'=n+1}^{\infty} \left(\frac{1}{n' - n} + \frac{1}{n' + n} \right)^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{n^3}{8} \sum_{n'=n+1}^{\infty} \left[\frac{1}{(n'-n)^3} + \frac{3}{(n'-n)^2(n'+n)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{(n'-n)(n'+n)^2} + \frac{1}{(n'+n)^3} \right] \\
&= \frac{n^3}{8} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^3} + \sum_{k=2n+1}^{\infty} \frac{1}{k^3} \right) \\
&\quad + \frac{3n^3}{8} \sum_{n'=n+1}^{\infty} \frac{1}{(n'-n)(n'+n)} \left(\frac{1}{n'-n} + \frac{1}{n'+n} \right) \\
&= \frac{n^3}{8} \left(2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^3} - \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^3} \right) + \frac{3n^2}{16} \sum_{n'=n+1}^{\infty} \left(\frac{1}{n'-n} - \frac{1}{n'+n} \right) \\
&\quad \times \left(\frac{1}{n'-n} + \frac{1}{n'+n} \right) = \frac{n^3}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^3} - \frac{n^3}{8} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^3} \\
&\quad + \frac{3n^2}{16} \left[\sum_{n'=n+1}^{\infty} \frac{1}{(n'-n)^2} - \sum_{n'=n+1}^{\infty} \frac{1}{(n'+n)^2} \right] \\
&= \frac{n^3}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^3} - \frac{n^3}{8} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^3} + \frac{3n^2}{16} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} - \sum_{k=2n+1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \right) \\
&= \frac{n^3}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^3} - \frac{n^3}{8} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^3} + \frac{3n^2}{16} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^2}.
\end{aligned}$$

Отже, ми отримуємо:

$$\sum_{n'=n+1}^{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n'^3 n^3}$$

$$= \frac{n^3}{4} \zeta(3) - \frac{n^3}{8} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^3} + \frac{3n^2}{16} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1}{k^2}, \quad (28.7)$$

де дзета-функція Рімана

$$\zeta(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^x},$$

причому

$$\zeta(3) = 1.202057.$$

Проілюструємо наші міркування конкретним розрахунком для $|1s\rangle \rightarrow |n'p\rangle$ переходу, коли $n = 1$. Ліва частина рівняння (28.6) нам відома з (26.23) і дорівнює 0.5650. А у правій, згідно з (28.7), сума дорівнює $\zeta(3)/4 + 3/32 = 0.394264$. Тепер з рівняння (28.6) знаходимо $0.5650 = 0.3943 \times \text{const}$, звідки

$$\text{const} = 1.4330.$$

Це значення узгоджується зі значенням $32/3\pi\sqrt{3} = 1.9602805$ з (28.3), яке дає точний квазікласичний розрахунок сил осцилятора.

На завершення, продовжуючи “гру в числа”, зробимо порівняння значень сил осцилятора для деяких переходів, отриманих з точних виразів і з наближених. Отже:

$$f_{1s \rightarrow 2p} = \begin{cases} 0.416197 & \text{— точне значення з (26.21),} \\ 0.580824 & \text{— згідно з (28.3),} \\ 0.424607 & \text{— згідно з (28.1).} \end{cases} \quad (28.8)$$

Аналогічно для переходу $|2s\rangle \rightarrow |3p\rangle$ знаходимо, що

$$\text{const} = 0.270368$$

і відповідні значення сили осцилятора:

$$f_{2s \rightarrow 3p} = \begin{cases} 0.434865 & \text{— точне значення з (27.4),} \\ 3.387365 & \text{— згідно з (28.3),} \\ 0.467196 & \text{— згідно з (28.1).} \end{cases} \quad (28.9)$$

Звідси випливає, що квазікласичний вираз для сил осциляторів достатньо добре працює і для малих значень квантових чисел, тобто його можна використовувати також для кількісних розрахунків, зокрема для коефіцієнта поглинання, якщо брати до уваги ще і правило сум.

§ 29. Вимірювання сил осцилятора

У попередніх параграфах було наведено розрахунок сил осциляторів для атома водню та воднеподібних йонів і атомів. Розрахунок величин $f_{A'A}$ для всіх інших атомів і йонів є непростою проблемою, оскільки хвильові функції для них навіть в одноелектронному підході можна знайти лише за допомогою тих або інших наближених методів. Серед них є різні варіанти варіаційних методів, і зокрема метод Гартрі–Фока, а також так звані напівемпіричні методи, які використовують експериментальні значення рівнів енергії та ефективні головні квантові числа. Кожен із цих методів має свої недоліки й переваги. Наприклад, варіаційний метод дає з достатньо високою точністю рівні енергії, але гірші результати для сил осциляторів порівняно з простими напівемпіричними методами. Отже, обчислення сил осциляторів — це окрема наука із широким розгалуженням, спеціальними конференціями й численною літературою, створеною зусиллями багатьох учених. Частково можна знайти поклики на ці праці й обговорення самої проблеми у списку монографій, що подані в кінці книжки.

Крім теоретичних розрахунків сил осциляторів, існує низка експериментальних методів їх визначення. Один із перших, який запропонував ще В. Він⁶, ґрунтується на вимірюванні часу загасання τ свічення спектральної лінії (див. § 11):

$$\tau \sim 1/\gamma, \quad \gamma = \frac{2e^2\omega_0^2}{mc^3} f_{A'A}, \quad (29.1)$$

⁶Вільгельм Він (1864–1928) — німецький фізик. У 1893 році вивів так званий закон зміщення для спектральної густини енергії випромінювання абсолютно чорного тіла. У 1911 році за відкриття законів теплового випромінювання його відзначено Нобелівською премією з фізики.

де γ — стала загасання, ω_0 — частота лінії.

Експериментальне визначення сил осциляторів у лабораторних умовах можливе і за показником заломлення n . Для газового середовища поблизу резонансної частоти $\omega = \omega_{A'A}$ для переходу $|A\rangle \rightarrow |A'\rangle$, коли головний внесок у n визначається формулою [8]

$$n^2 = 1 + \frac{4\pi e^2 N}{mV} \frac{\rho_A f_{A'A}}{\omega_{A'A}^2 - \omega^2},$$

за відомими значеннями показника заломлення n та густини атомів $N_A/V = N\rho_A/V$ в стані $|A\rangle$ визначаємо силу осцилятора $f_{A'A}$. Якщо N_A невідоме, то визначаємо відносні значення $f_{A'A}$ для різних ліній.

Зупинімося на методі вимірювання сил осцилятора за інтегральним коефіцієнтом поглинання в лінії. Візьмімо вираз (13.18) для коефіцієнта поглинання, що враховує ефекти загасання, тобто лоренцівський контур і доплерівське розширення лінії, і проінтегруймо його за всіма частотами:

$$\int_0^\infty \kappa(q) d\omega = \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \rho_a \int_0^\infty f_{a'a}(q) (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \frac{H(\alpha, v)}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}} d\omega. \quad (29.2)$$

Оскільки ми весь час обмежуємось лише дипольними переходами, то у виразі (13.9) для $f_{a'a}(q)$ покладемо $\mathbf{k} = 0$. Тобто, замість величини $f_{a'a}(q)$, беремо силу осцилятора $f_{a'a}$. Крім того, у множнику $\exp(-\hbar\omega/T)$ частоту ω приймаємо рівною резонансній частоті ω_0 , тому що інтегрування за ω в (29.2), внаслідок різкого профілю лінії, відбувається фактично в межах її ширини. Нарешті інтеграл, що залишається,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \kappa(q) d\omega &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \rho_a f_{a'a} (1 - e^{-\hbar\omega_0/T}) \int_0^\infty \frac{H(\alpha, v)}{\Delta\omega_D \sqrt{\pi}} d\omega \\ &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \rho_a f_{a'a} (1 - e^{-\hbar\omega_0/T}) \int_{-\omega_0/\Delta\omega_D}^\infty \frac{H(\alpha, v)}{\sqrt{\pi}} dv, \end{aligned} \quad (29.3)$$

стосується лише функції Фойґта. Нижню межу інтеграла, унаслідок того, що $\omega_0 \gg \Delta\omega_D$, тягнемо на “мінус безмежність”, і згідно з умовою нормування (15.2) для функції Фойґта цей інтеграл дорівнює одиниці. У результаті маємо

$$\int_0^{\infty} \chi(q) d\omega = \frac{2\pi^2 e^2 N_a}{mcV} f_{a'a} (1 - e^{-\hbar\omega_0/T}), \quad (29.4)$$

де $N_a = \rho_a N$ — кількість атомів у “нижньому” стані $|a\rangle$, з якого атом переходить у збуджений $|a'\rangle$ при поглинанні фотона. Як правило, $\hbar\omega_0/T \gg 1$, і тому кругла дужка у (29.4) дорівнює одиниці.

Рівняння (29.4) за його відомою з експерименту лівою частиною шляхом вимірювання глибин спектральних ліній зорі дозволяє знаходити величину $\rho_a f_{a'a}$ або $N_a f_{a'a}/V$. Нарешті, якщо відомо кількість атомів в одиниці об’єму, що перебувають у стані $|a\rangle$, то звідси знаходимо силу осцилятора $f_{a'a}$. Власне в цьому і полягає проблема, оскільки визначення N_a/V є найбільшим джерелом неточностей в установленні, як кажуть, зоряних сил осциляторів. Зокрема і сонячну атмосферу з успіхом використовують як природне високотемпературне газове середовище для визначення сил осцилятора⁷. Детальний опис створення сонячних сил осцилятора за лініями фраунгоферового спектра подано в [18].

Торкнемось важливого питання щодо виконання правила сум для виміряних експериментально сил осциляторів. Для того, щоб перевірити це правило, потрібно виміряти сили осцилятора $f_{A'A}$ для всіх значень квантових чисел A' при заданому значенні A , тобто для всіх переходів із квантового стану $|A\rangle$ як “уверх”, так і “вниз”. Однак це неможливо. Справді, не всі квантові переходи оптичного електрона є фізично здійсненними, тому що в багатоелектронному атомі частина атомних станів $|A'\rangle$ зайнята. Підкреслимо, що мова йде не про те, що сила осцилятора для

⁷Для Сонця це стало можливим після того, як у 1929 році Г. Рассел опублікував хімічний уміст сонячної атмосфери.

переходу $|A\rangle \rightarrow |A'\rangle$ дорівнює нулеві: взагалі кажучи, вона відмінна від нуля, якщо перехід дозволений симетрійними властивостями хвильових функцій, які описують ці стани. Отже, якщо експериментальні значення сил осцилятора $f_{A'A}$ підсумувати за індексом A' , то ми не обов'язково отримуємо одиницю у правій частині формули (24.4).

Наприклад, для Na маємо електронну конфігурацію: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Оскільки $|2p\rangle$ -стани повністю заповнені, то перехід "униз" $|3s\rangle \rightarrow |2p\rangle$ є фізично нездійснювальним, хоча сила осцилятора, розрахована як для водневоподібного атома, відмінна від нуля. Якщо обчислити її як для водневоподібного атома, то

$$f_{3s \rightarrow 2p} = -3f_{2p \rightarrow 3s} = -3^5 \cdot 4 \left(\frac{2}{5}\right)^{11} = -0.040769.$$

Сказане потребує ще одного уточнення: сили осцилятора, підсумовані за магнітним квантовим числом, задовольняють не просту рівність $f_{A'A} = -f_{AA'}$, а з відповідними статистичними вагами.

РОЗДІЛ V

СТАЛА ЗАГАСАННЯ

§ 30. Енергія взаємодії атома з частинками оточення

Розрахунок сталої загасання $\gamma_{A'A}$ та зсуву частоти $\Delta\omega_{A'A}$ за теорією ударного наближення передбачає знання конкретного вигляду енергії взаємодії атома, що поглинає електромагнітне випромінювання, зі збуджуючими частинками оточення. У зв'язку з цим докладніше розгляньмо цю величину.

Отже, нехай заряд ядра атома, що поглинає фотони, дорівнює Z_0 , а вектором \mathbf{R} позначимо координату ядра. Координати N_e електронів атома відносно ядра, квантові переходи яких і утворюють вибрану спектральну лінію атома, позначаємо через $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_e}$. Для нейтрального атома у випадку його одноелектронної моделі, тобто коли роль решти електронів зводимо лише до екранування ядра, очевидно $N_e = Z_0$. Позначимо далі координати центра мас N_p збуджуючих частинок векторами $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_{N_p}$. Коли ж збуджуюча частинка з номером a є атомом з N_e^a електронами, то позначатимемо координати цих електронів відносно свого ядра з номером a і зарядом Z_a через $\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2a}, \dots, \mathbf{r}_{a N_e^a}$. Якщо збудуючі частинки є вільними зарядами, то, очевидно, центри мас збігаються з їхніми координатами, тобто маємо $\mathbf{r}_{aj} = 0$, $a = 1, 2, \dots$

Випишімо тепер енергію кулонівської взаємодії атома з частинками оточення:

$$\hat{V} = \sum_{a=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_0 Z_a}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{a=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_a}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_a|}$$

$$- \sum_{a=1}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_e^a} \frac{e^2 Z_0}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_{aj} - \mathbf{R}_a|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{a=1}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_e^a} \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_a - \mathbf{r}_{aj}|}. \quad (30.1)$$

Використаймо далі оператор зсуву, яким ми вже послуговувались раніше (див. виноску на стор. 100, формули (17.1), (17.2)). Отже, без зайвих коментарів маємо (оператор ∇ діє на \mathbf{R}):

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{a=1}^{N_p} \frac{e^2 Z_0 Z_a}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} - \sum_{a=1}^{N_p} \sum_{i=1}^{N_e} e^{\mathbf{r}_i \nabla} \frac{e^2 Z_a}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} \\ &- \sum_{a=1}^{N_p} \sum_{j=1}^{N_e^a} e^{-\mathbf{r}_{aj} \nabla} \frac{e^2 Z_0}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} \\ &+ \sum_{a=1}^{N_p} \sum_{i=1}^{N_e} e^{\mathbf{r}_i \nabla} \sum_{j=1}^{N_e^a} e^{-\mathbf{r}_{aj} \nabla} \frac{e^2 Z_a}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} \quad (30.2) \\ &= \sum_{a=1}^{N_p} \left(\sum_{i=1}^{N_e} e^{\mathbf{r}_i \nabla} - Z_0 \right) \left(\sum_{j=1}^{N_e^a} e^{-\mathbf{r}_{aj} \nabla} - Z_a \right) \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|}. \end{aligned}$$

Уведемо оператор узагальненого заряду атома

$$\hat{Q} = e \left(\sum_{i=1}^{N_e} e^{\mathbf{r}_i \nabla} - Z_0 \right) \quad (30.3)$$

і відповідний оператор для збурюючої частинки сорту a

$$\hat{Q}_a = e \left(\sum_{j=1}^{N_e^a} e^{\mathbf{r}_{aj} \nabla} - Z_a \right). \quad (30.4)$$

Тепер наш оператор збурення можна записати так:

$$\hat{V} = \hat{Q} \sum_{a=1}^{N_p} \hat{Q}_a^+ \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|}, \quad (30.5)$$

де введено звичайним способом спряжений оператор заряду

$$\hat{Q}_a^+ = e \left(\sum_{j=1}^{N_e} e^{-\mathbf{r}_{aj}} \nabla - Z_a \right). \quad (30.6)$$

Таким чином, оператор збурення \hat{V} формально має вигляд енергії кулонівської взаємодії частинок з операторними зарядами \hat{Q} та \hat{Q}_a^+ .

Якщо у виразі для \hat{Q} і \hat{Q}_a при зв'язаних станах електронів зробити розклади експоненти в ряд, то отримуємо мультипольні розклади:

$$\hat{Q} = Q + \mathbf{d} \nabla + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} Q_{\alpha\beta} \nabla_\alpha \nabla_\beta + \dots, \quad (30.7)$$

$$Q = e(N_e - Z_0) \quad (30.8)$$

— електричний заряд атома,

$$\mathbf{d} = e \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{r}_i \quad (30.9)$$

— електричний дипольний момент атома,

$$Q^{\alpha\beta} = e \sum_{i=1}^{N_e} x_i^\alpha x_i^\beta \quad (30.10)$$

— його електричний квадрупольний момент¹; тут x_i^α — декартові координати i -того електрона відносно ядра, $\alpha = 1, 2, 3$, так що

¹Електричний квадрупольний момент, “нормований” стандартно, так, щоб слід матриці $Q^{\alpha\beta}$ дорівнював нулеві, визначають у такий спосіб:

$$Q^{\alpha\beta} = e \sum_{i=1}^{N_e} \left(3x_i^\alpha x_i^\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta} \right).$$

Член із символом Кронекера дає нульовий внесок в енергію взаємодії \hat{V} внас-

$x_i^1 = x_i, x_i^2 = y_i, x_i^3 = z_i; \nabla_\alpha = \partial/\partial X^\alpha$ — складові оператора градієнта за компонентами вектора $\mathbf{R} = \mathbf{R}(X, Y, Z), X^1 = X, X^2 = Y, X^3 = Z$.

Аналогічні вирази матимемо і для операторного заряду збурюючої частинки, якщо це нейтральний атом або йон з електронами у зв'язаних станах:

$$\hat{Q}_a = Q_a + \mathbf{d}_a \nabla + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} Q_a^{\alpha\beta} \nabla_\alpha \nabla_\beta + \dots, \quad (30.11)$$

де відповідні електричні мультипольні моменти

$$\begin{aligned} Q_a &= e(N_e^a - Z_a), \\ \mathbf{d}_a &= e \sum_{j=1}^{N_e^a} \mathbf{r}_{ja}, \\ Q_a^{\alpha\beta} &= e \sum_{j=1}^{N_e^a} x_{ja}^\alpha x_{ja}^\beta. \end{aligned} \quad (30.12)$$

Коли збурюючі частинки є вільними зарядами, то оператор \hat{Q}_a зводиться просто до електричного заряду частинки Q_a . Таким чином, якщо атом взаємодіє із системою вільних зарядів, $\mathbf{r}_{ja} = 0$ і $\hat{Q}_a = Q_a$, то вираз для енергії \hat{V} за умови електронейтральності $\sum_a Q_a = 0$ збігається з формулою (17.2) з відповідними перепозначеннями.

Випишімо далі для прикладу енергію взаємодії нейтрального атома ($Q = 0$) з нейтральною збурюючою частинкою з номером

лідок того, що кулонівський потенціал задовольняє рівняння Лапласа:

$$\sum_{\alpha\beta} r^2 \delta_{\alpha\beta} \nabla_\alpha \nabla_\beta \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} = r^2 \nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} = 0.$$

З цього означення випливає, що $Q^{\alpha\beta}$ має п'ять незалежних компонент, оскільки $Q^{\alpha\beta} = Q^{\beta\alpha}$ і $\sum_\alpha Q^{\alpha\alpha} = 0$. Очевидно, що остаточні результати не залежатимуть від того, яке означення ми приймаємо для $Q^{\alpha\beta}$.

a ($Q_a = 0$) в дипольному наближенні:

$$\begin{aligned}\hat{V} &= -(\mathbf{d}\nabla)(\mathbf{d}_a\nabla)\frac{1}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_a|} \\ &= \frac{(\mathbf{d}\mathbf{d}_a) - 3(\mathbf{d}\mathbf{n})(\mathbf{d}_a\mathbf{n})}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_a|^3},\end{aligned}\quad (30.13)$$

де одиничний вектор $\mathbf{n} = (\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)/|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|$.

Коли ж атом має заряд Q , а збурююча частинка є нейтральною з дипольним моментом \mathbf{d}_a , то

$$\hat{V} = Q\frac{\mathbf{d}_a(\mathbf{R} - \mathbf{R}_a)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|^3}.\quad (30.14)$$

Навпаки, коли вибраний атом, що поглинає фотони, є нейтральним з дипольним моментом \mathbf{d} , а збурююча частинка несе на собі заряд, то

$$\hat{V} = Q_a\frac{\mathbf{d}(\mathbf{R}_a - \mathbf{R})}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|^3}.\quad (30.15)$$

У конкретних розрахунках для всіх потрібних нам випадків енергію \hat{V} будемо виписувати із загальної формули (30.5).

Запишімо енергію \hat{V} , використовуючи фур'є-перетворення кулонівського потенціалу:

$$\frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{4\pi}{q^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a)},\quad (30.16)$$

тут компоненти хвильового вектора \mathbf{q} набувають цілочисельних значень, кратних до $2\pi/L$, де L — довжина ребра кубічного ящика об'ємом $V = L^3$, у якій розташована наша система. Перехід від підсумовування за \mathbf{q} до інтегрування здійснюємо так само, як і у формулі (2.1). Отже, підставляючи (30.16) у (30.5) і діючи операторами зсуву в зарядах \hat{Q} та \hat{Q}_a на експоненти, з (30.16) знаходимо:

$$\hat{V} = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{a=1}^{N_p} \frac{4\pi Q(\mathbf{q})Q_a(-\mathbf{q})}{Vq^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a)},\quad (30.17)$$

де

$$Q(\mathbf{q}) = e \left(\sum_{i=1}^{N_e} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} - Z_0 \right), \quad (30.18)$$

$$Q_a(\mathbf{q}) = e \left(\sum_{j=1}^{N_e^a} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{aj}} - Z_a \right). \quad (30.19)$$

Іноді зручніше використовувати ці формули, ніж (30.3)–(30.6).

Перейдімо тепер до встановлення виразу для потенціальної енергії взаємодії U_A атома, що перебуває у стані $|A\rangle$ з частинками оточення. Для цього необхідно знайти середнє значення повної енергії системи “атом плюс збурююча частинка” при фіксованій відстані між ними $r = |\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|$.

Нехай атом знаходиться у стані $|A\rangle$, а збурююча частинка у стані $|f\rangle$, так що повна хвильова функція атома і частинки, що не взаємодіють між собою, дорівнює

$$|A, f\rangle = |A\rangle|f\rangle. \quad (30.20)$$

Ми спеціально вживатимемо круглу дужку в діраківських позначеннях станів збурюючих частинок. За схемою стандартної квантовомеханічної теорії збурень енергія U_A в першому порядку дорівнює середньому значенню оператора \hat{V} в стані $|A, f\rangle$:

$$U_A(r) = \langle A, f | \hat{V} | f, A \rangle. \quad (30.21)$$

Розгляньмо взаємодію нейтрального атома з точковим зарядом величини Q_a , коли оператор збурення \hat{V} дано виразом (30.15):

$$U_A(r) = \frac{Q_a}{r^2} \langle A | \mathbf{d} | A \rangle \mathbf{n}, \quad (30.22)$$

де одиничний вектор \mathbf{n} , спрямований уздовж лінії, що з'єднує атом із зарядом (нехай $\mathbf{n} || z$). Оскільки середнє значення електричного дипольного моменту $\langle A | d_z | A \rangle = 0$, то й $U_A(r) = 0$. Винятком є лише атом водню, для якого це середнє значення для

збуджених станів, унаслідок їх виродження, є відмінним від нуля і дорівнює [13]

$$\langle A|d_z|A\rangle = -\frac{3}{2}ea_B n(n_1 - n_2),$$

де n, n_1, n_2 — параболічні квантові числа. Отже, для водню енергія його взаємодії із зарядом не дорівнює нулеві вже в першому порядку теорії збурень:

$$U_A(r) = -\frac{3}{2}eQ_a a_B \frac{n(n_1 - n_2)}{r^2}. \quad (30.23)$$

Для інших атомів необхідно звернутись до другого порядку теорії збурень

$$U_A(r) = \sum_{A_1} \sum_{f_1} \frac{|\langle A, f|\hat{V}|A_1, f_1\rangle|^2}{E_A + E_f^a - E_{A_1} - E_{f_1}^a}, \quad (30.24)$$

$(A_1, f_1 \neq A, f)$

де E_A — енергія атома в стані $|A\rangle$, а E_f^a — енергія збурюючої частинки в стані $|f\rangle$. Підставляючи в (30.24) оператор \hat{V} з (30.15), знаходимо енергію йон-атомного потенціалу:

$$U_A(r) = -\frac{Q_a^2 \beta_A}{2r^4}, \quad (30.25)$$

де поляризованість атома в стані $|A\rangle$

$$\beta_A = 2 \sum_{A_1} \frac{|\langle A|d_z|A_1\rangle|^2}{E_{A_1} - E_A}. \quad (30.26)$$

$(A_1 \neq A)$

Цю величину можна записати через силу осцилятора, яку ми означили виразом (11.7):

$$f_{A_1 A} = \frac{2m\omega_{A_1 A}}{\hbar} \left| \langle A_1|z|A\rangle \right|^2. \quad (30.27)$$

Отже,

$$\beta_A = \frac{\hbar^2 e^2}{m} \sum_{\substack{A_1 \\ (A_1 \neq A)}} \frac{f_{A_1 A}}{(E_{A_1} - E_A)^2}. \quad (30.28)$$

Енергію взаємодії атома з нейтральною частинкою отримаємо у другому порядку теорії збурень (30.24) за оператором збурення \hat{V} з (30.13). Вибираючи напрям \mathbf{n} уздовж осі z і усереднюючи за кутами, знаходимо

$$U_A(r) = -\frac{C_6^A}{r^6}, \quad (30.29)$$

де

$$\begin{aligned} C_6^A &= \sum_{\substack{A_1 \\ (A_1, f_1 \neq A, f)}} \sum_{f_1} \left\{ 4|\langle A|d^z|A_1\rangle|^2 |(f|d_a^z|f_1)|^2 \right. \\ &+ |\langle A|d^x|A_1\rangle|^2 |(f|d_a^x|f_1)|^2 + |\langle A|d^y|A_1\rangle|^2 |(f|d_a^y|f_1)|^2 \left. \right\} \\ &\times \frac{1}{E_{A_1} + E_{f_1}^a - E_A - E_f^a}, \end{aligned} \quad (30.30)$$

причому цю величину потрібно усереднити ще за початковими станами $|f\rangle$ збурюючої частинки. Величину (33.29) називають потенціальною енергією Ван дер Ваальса, а сталу C_6^A — константою Ван дер Ваальса. Сталу C_6^A розраховують, використовуючи значення сил осцилятора. Експериментальні визначення C_6^A ґрунтуються на вимірюванні перерізу пружного розсіяння або для однакових атомів — на вимірюванні в'язкості газів.

Урахування вищих мультипольних моментів (30.12) в операторі збурення приводить до вищих степенів оберненої відстані в потенціальній енергії. У загальному її можна зобразити розкладом у ряд:

$$U_A(r) = -\sum_{k \geq 0} \frac{C_{n+2k}^A}{r^{n+2k}}. \quad (30.31)$$

При $n = 4$ маємо йон-атомний потенціал; $n = 6$ — це потенціал взаємодії між двома нейтральними атомами, яка визначається, в основному, ван-дер-ваальсівською взаємодією. Числові значення силових констант C_n для різних типів міжчастинкових взаємодій можна знайти в [27].

Мультипольний розклад (30.31) працює, коли відстані між частинками великі. Це реалізується в такій розрідженій газовій системі, якою є атмосфера зорі. Якщо частинки перебувають на відстанях, сумірних з їхніми розмірами, то усереднення за електронними станами необхідно провести, використовуючи формулу (30.17) для оператора збурення \hat{V} без розкладу зарядів (30.18), (30.19) у ряд за степенями \mathbf{q} .

§ 31. Розрахунок фаз розсіяння

Маючи явний вираз для потенціальної енергії взаємодії між атомом і збурюючою частинкою (30.31), можемо взятися за обчислення величини γ_A за формулою (21.13). Перше завдання, яке стоїть перед нами, — це розрахунок фаз розсіяння (21.10).

Підставляючи (30.31) в (21.10), знаходимо

$$\delta = \sum_{k \geq 0} \frac{2C_{n+2k}^A}{v\hbar} \int_{\rho}^{\infty} \frac{dr}{r^{n+2k} \sqrt{1 - (\rho/r)^2}}. \quad (31.1)$$

Зробимо заміну змінних $x = (\rho/r)^2$, після якої вираз (31.1) набуває такого вигляду:

$$\delta = \sum_{k \geq 0} \frac{C_{n+2k}^A}{v\hbar \rho^{n+2k-1}} \int_0^1 x^{(n+2k-3)/2} (1-x)^{-1/2} dx. \quad (31.2)$$

Цей інтеграл зводиться до B -інтеграла Ейлера і виражається через Γ -функції [28]:

$$\int_0^1 t^{y-1} (1-t)^{z-1} dt = \frac{\Gamma(y)\Gamma(z)}{\Gamma(y+z)}, \quad (31.3)$$

$$\operatorname{Re} y > 0, \operatorname{Re} z > 0.$$

Тепер з (31.2) одержуємо

$$\delta = \sum_{k \geq 0} \frac{C_{n+2k}^A}{v \hbar \rho^{n+2k-1}} \frac{\Gamma(1/2) \Gamma(k + \frac{n-1}{2})}{\Gamma(k + \frac{n}{2})}, \quad n > 1. \quad (31.4)$$

Умова $n > 1$ впливає з умови $\operatorname{Re} y > 0$ в означенні (31.3) при $k = 0$.

Зробимо зауваження до цього результату. Вираз (21.8) чи (21.10), який визначає фазу розсіяння через потенціал $U_A(r)$, — це лише лінійний член розкладу за $U_A(r)$ квазікласичного виразу для δ . Для розрідженого середовища, яким є зоряна атмосфера, важливо врахувати “степеневі хвости” потенціалу $U_A(r)$, оскільки середні відстані між частинками великі. Саме такий вигляд потенціалу фіксує формула (30.31), і як наслідок маємо вираз (31.4) для фази δ . Якщо врахувати для δ наступний квадратичний член розкладу за $U_A(r)$, то головний внесок у фазу буде пропорційним до $1/v^3 \rho^{2n-1}$. Отже, його внесок у δ є таким щодо оберненої прицільної відстані ρ , як і k -тий член розкладу в (31.4) з $k = n/2$. Для ван-дер-ваальсівської взаємодії ($n = 6$) — це четвертий член розкладу. Тобто здавалось би, що коректним є утримання в (31.4) постван-дер-ваальсівських взаємодій лише до $k = 2$. Однак потрібно врахувати, що квадратичний внесок у δ має додатковий множник $1/v^2$, який в остаточному підсумку дасть старші члени розкладу γ_A за температурою.

Перейдімо до обговорення непружних зіткнень атома з частинками оточення, тобто зіткнень, які змінюють внутрішній стан частинок. У цьому випадку амплітуда розсіяння f менша, ніж при чисто пружному розсіянні, оскільки є додаткові канали виводу атома з його початкового стану. У виразі (21.13) для γ_A це враховано у той спосіб, що фаза розсіяння замінена комплексною величиною

$$\delta = \delta' + i\delta'' . \quad (31.5)$$

Уявна частина фази δ'' визначає внесок непружних зіткнень. Величина δ'' є коефіцієнтом послаблення розсіяної хвилі ($\delta'' \geq 0$),

і головний внесок у її величину даватиме другий порядок теорії збурень за оператором \hat{V} з (30.5) або (30.17), що визначає взаємодію атома з ядром та усіма електронами збурюючої частинки. Отже, величина δ'' такого ж порядку, що й потенціальна енергія $U_A(r)$, яка також є результатом другого наближення за оператором \hat{V} (за винятком взаємодії атома водню в збудженому стані з йонами внаслідок виродження цих станів, про що йшлося в § 30).

Отже, оскільки головний внесок у величину δ'' є лінійним за $U_A(r)$, то природно припустити, що $\delta'' \sim \delta'$, причому дійсна частина фази δ' визначена формулою (21.10). Беручи до уваги все сказане, покладаємо

$$\delta'' = p\delta', \quad (31.6)$$

де p називатимемо параметром непружних зіткнень. Величина p є вільним параметром теорії, однак за своїм змістом він повинен змінюватись у таких межах ($p \geq 0$ для $\delta' > 0$): $0 \leq p \lesssim 1$.

Таким чином, фаза розсіяння δ , що враховує і пружні, і непружні зіткнення, як впливає з (31.5), (31.6) та (31.4), дорівнює

$$\delta = (1 + ip) \sum_{k \geq 0} \frac{C_{n+2k}^A}{v\hbar\rho^{n+2k-1}} \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(k + \frac{n-1}{2})}{\Gamma(k + \frac{n}{2})}, \quad n > 1. \quad (31.7)$$

Слід очікувати, що результати розрахунків сталої загасання з використанням цього виразу будуть коректними, якщо залежність від параметра непружних p зіткнень достатньо слабка в проміжку його можливих значень.

§ 32. Час життя квазістаціонарних станів і зсув енергетичних рівнів атома

Зсув рівнів енергії атома ΔE_A та час його життя $1/\gamma_A$ у стані $|A\rangle$ зумовлені зіткненнями зі збурюючими частинками визначає загальний вираз (21.13), а знайдена в попередньому параграфі фаза розсіяння (31.7) дозволяє провести розрахунок цих величин

до кінця. Отже, з (21.13) та (31.7) знаходимо:

$$\frac{i}{\hbar} \Delta E_A + \frac{\gamma_A}{2} = \frac{N_p}{V} \langle vI \rangle, \quad (32.1)$$

а інтеграл

$$I = 2\pi \int_0^{\infty} (1 - e^{-z\eta}) \rho d\rho, \quad (32.2)$$

де

$$z = p - i, \quad (32.3)$$

$$\eta = \frac{C_n^A}{v\hbar} \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(\frac{n-1}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})} \left(\frac{1}{\rho^2}\right)^{\frac{n-1}{2}} \sum_{k \geq 0} \frac{c_k}{\rho^{2k}}, \quad (32.4)$$

$$c_k = \frac{C_{n+2k}^A}{C_n^A} \frac{\Gamma(k + \frac{n-1}{2}) \Gamma(\frac{n}{2})}{\Gamma(k + \frac{n}{2}) \Gamma(\frac{n-1}{2})}. \quad (32.5)$$

Інтегруємо в (32.2) частинами:

$$I = \pi \rho^2 (1 - e^{-z\eta}) \Big|_0^{\infty} - \pi z \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-z\eta} \frac{d\eta}{d\rho} d\rho. \quad (32.6)$$

Перший доданок дорівнює нулеві ($n > 3$), якщо взяти до уваги (32.4), а в інтегралі напрошується перехід до нової змінної інтегрування η . З урахуванням того, що $\eta = 0$ при $\rho = \infty$ і $\eta = \infty$ при $\rho = 0$ з (32.6), одержуємо

$$I = \pi z \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-z\eta} d\eta. \quad (32.7)$$

Тепер залишилось знайти з рівняння (32.4) величину ρ^2 як функцію η . З цією метою ряд (32.4) запишімо так:

$$x = y^{-m} \left(1 + \frac{c_1}{y} + \frac{c_2}{y^2} + \dots \right), \quad (32.8)$$

$$x = \eta \frac{v\hbar}{C_n^A} \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)},$$

$$m = \frac{n-1}{2}, \quad (32.9)$$

$$y = \rho^2.$$

Обернімо ряд (32.8), тобто визначимо $1/y$ у вигляді ряду за x , а наступним кроком “перевернемо” отриманий ряд і знайдемо вже величину $y = \rho^2$ у вигляді ряду за x . Виконуючи ці дії, маємо²

$$\rho^2 = x^{-1/m} \sum_{k \geq 0} a_k x^{k/m}, \quad (32.10)$$

де

$$a_0 = 1,$$

$$a_1 = \frac{c_1}{m},$$

$$a_2 = \frac{1}{m} \left[c_2 - c_1^2 \frac{m+1}{2m} \right], \quad (32.11)$$

$$a_3 = \frac{1}{m} \left[c_3 - c_1 c_2 \frac{m+2}{m} + c_1^3 \frac{(m+1)(m+2)}{3m^2} \right],$$

$$a_4 = \frac{1}{m} \left[c_4 - c_2^2 \frac{m+3}{2m} - c_1 c_3 \frac{m+3}{m} \right]$$

²Для виконання цього завдання можна також використати стандартні комп'ютерні програми для аналітичних розрахунків.

$$\left. + c_1^2 c_2 \frac{(m+3)(2m+3)}{2m^2} - c_1^4 \frac{(m+1)(m+3)(2m+3)}{8m^3} \right]$$

.....

Підставляємо вираз (32.10) до (32.7) і переходимо до інтегрування за x :

$$I = \pi z \frac{C_n^A}{v\hbar} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{k \geq 0} a_k \int_0^{\infty} x^{\frac{k-1}{m}} e^{-sx} dx, \quad (32.12)$$

$$s = z \frac{C_n^A}{v\hbar} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}, \quad n > 3.$$

За означенням цей інтеграл зводиться до Γ -функції [28]:

$$\int_0^{\infty} x^{\nu-1} e^{-sx} dx = s^{-\nu} \Gamma(\nu), \quad (32.13)$$

$$\operatorname{Re} \nu > 0, \operatorname{Re} s > 0, \text{ або } \operatorname{Re} s = 0, 0 < \operatorname{Re} \nu < 1.$$

Тепер

$$I = \pi \sum_{k \geq 0} a_k \left(\frac{v\hbar}{z C_n^A} \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} \right)^{\frac{k-1}{m}} \Gamma\left(1 + \frac{k-1}{m}\right), \quad (32.14)$$

$$n > 3.$$

Умова на показник потенціалу $n > 3$ впливає з умови $\operatorname{Re} \nu > 0$ у (32.13),

$$\nu = 1 + \frac{k-1}{m} = 1 + \frac{2(k-1)}{n-1},$$

при $k = 0$. Звідси виходить, що з нашого розгляду випадає важлива задача про розширення за ударним механізмом спектральних ліній атома водню електронами. Оскільки тут потенціал

(30.23) має показник $n = 2$, то виникають розбіжні інтеграли. Цю задачу ми розглянемо пізніше окремо.

Зробімо нарешті останній крок і, згідно з (32.1), виконаймо усереднення за швидкостями, вважаючи, як і в § 14, що розподіл за швидкостями $w(\mathbf{v})$ є максвеллівським з ефективною температурою T^* з (14.6), яка враховує мікротурбулентні рухи зоряної атмосфери:

$$w(\mathbf{v}) = e^{-M\mathbf{v}^2/2T^*} \Big/ \int e^{-M\mathbf{v}^2/2T^*} d\mathbf{v}, \quad (32.15)$$

$$\int d\mathbf{v} = \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z,$$

$$\langle \dots \rangle = \int w(\mathbf{v})(\dots) d\mathbf{v}. \quad (32.16)$$

Підставмо вираз (32.14) у (32.1):

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \Delta E_A + \frac{\gamma_A}{2} &= \frac{N_p}{V} \pi \sum_{k \geq 0} a_k \\ &\times \left(\frac{\hbar}{z C_n^A} \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} \right)^{\frac{k-1}{m}} \langle v^{\frac{k-1}{m}+1} \rangle \Gamma\left(1 + \frac{k-1}{m}\right). \end{aligned} \quad (32.17)$$

Перейдімо в означенні середнього (32.16) до сферичних координат для змінної інтегрування \mathbf{v} і знайдемо

$$\langle v^\nu \rangle = \frac{\int_0^\infty v^{\nu+2} e^{-Mv^2/2T^*} dv}{\int_0^\infty v^2 e^{-Mv^2/2T^*} dv}.$$

Ці інтеграли заміною $x = Mv^2/2T^*$ зводимо до Γ -функцій (32.13) і одержуємо, що

$$\langle v^\nu \rangle = \left(\frac{2T^*}{M} \right)^{\nu/2} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}. \quad (32.18)$$

Далі комплексну величину z з (32.3) зображуємо у тригонометричній формі через модуль і фазу:

$$z = \sqrt{1+p^2} \exp \left[-i \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{p} \right) \right]. \quad (32.19)$$

Підстановка (32.18), (32.19) в (32.17) після виділення дійсної й уявної частини дає такий результат:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E_A}{\hbar} &= \frac{N_p}{V} 2\sqrt{\pi} \sum_{k \geq 0} a_k \left(\frac{\hbar}{C_n^A} \frac{\Gamma \left(\frac{n}{2} \right)}{\Gamma \left(\frac{1}{2} \right) \Gamma \left(\frac{n-1}{2} \right)} \right)^{\frac{k-1}{m}} \\ &\times \left(\frac{2T^*}{M} \right)^{\frac{k-1}{2m} + \frac{1}{2}} \Gamma \left(1 + \frac{k-1}{m} \right) \\ &\times \Gamma \left(\frac{k-1}{2m} + 2 \right) (1+p^2)^{-\frac{k-1}{2m}} \sin \left[\frac{k-1}{m} \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{p} \right) \right], \end{aligned} \quad (32.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_A}{2} &= \frac{N_p}{V} 2\sqrt{\pi} \sum_{k \geq 0} a_k \left(\frac{\hbar}{C_n^A} \frac{\Gamma \left(\frac{n}{2} \right)}{\Gamma \left(\frac{1}{2} \right) \Gamma \left(\frac{n-1}{2} \right)} \right)^{\frac{k-1}{m}} \\ &\times \left(\frac{2T^*}{M} \right)^{\frac{k-1}{2m} + \frac{1}{2}} \Gamma \left(1 + \frac{k-1}{m} \right) \\ &\times \Gamma \left(\frac{k-1}{2m} + 2 \right) (1+p^2)^{-\frac{k-1}{2m}} \cos \left[\frac{k-1}{m} \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{p} \right) \right], \end{aligned} \quad (32.21)$$

нагадаємо, що тут $m = (n-1)/2$, а M — приведена маса атома.

Зсув частоти спектральної лінії $\Delta\omega_{A'A}$ та стала загасання $\gamma_{A'A}$, зумовлені зіткненнями атома з частинками середовища, даються формулами (21.17), (21.18). Тобто величина $\Delta\omega_{A'A}$ є різницею виразів (32.20) для атомних станів $|A'\rangle$ та $|A\rangle$, а $\gamma_{A'A}/2$ — сумою виразів (32.21) для цих станів. При цьому слід брати

до уваги, що не тільки константи потенціальної енергії взаємодії C_n^A , які входять до a_k , але й параметр непружних зіткнень p , узагалі кажучи, різні для різних станів. Якщо вважати, що ці величини є однакові для всіх атомних станів, то, очевидно, зсув частоти $\Delta\omega_{A'A} = 0$, а стала загасання $\gamma_{A'A} = 2\gamma_A$. Зрозуміло, що ефекти збурення атома залежать від того, у якому стані він перебуває. Тому цей крайній випадок може реалізуватись хіба що випадково або для станів, які є близькими за своїми характеристиками. Зважаючи на мализну внесків непружного розсіяння та невизначеність параметра p , його можна вибрати однаковим для станів $|A'\rangle$ та $|A\rangle$, між якими відбувається висвічування спектральної лінії. Щодо констант взаємодії C_n^A , то таке припущення є сильною натяжкою.

§ 33. Ван-дер-ваальсівська стала загасання

Виділимо в рівнянні (32.21) головний внесок, тобто перший член ряду, коли $k = 0$, і для сталої загасання $\gamma_{A'A} = \gamma_{A'} + \gamma_A$, яку позначимо в цьому наближенні через $\gamma_{A'A}^0$, одержимо такий вираз:

$$\begin{aligned} \gamma_{A'A}^0 &= \frac{N_p}{V} 4\sqrt{\pi} \left(\frac{2T^*}{M} \right)^{\frac{n-3}{2(n-1)}} \left[\frac{C_n}{\hbar} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \right]^{\frac{2}{n-1}} \\ &\times \Gamma\left(\frac{n-3}{n-1}\right) \Gamma\left(\frac{2n-3}{n-1}\right) \\ &\times (1+p^2)^{\frac{1}{n-1}} \cos \left[\frac{2}{n-1} \arctg \left(\frac{1}{p} \right) \right], \end{aligned} \quad (33.1)$$

де введено позначення C_n , а саме

$$C_n^{2/(n-1)} = \left(C_n^{A'} \right)^{2/(n-1)} + \left(C_n^A \right)^{2/(n-1)}. \quad (33.2)$$

Для зсуву частоти перший член ряду (32.20) дає:

$$\begin{aligned} \Delta\omega_{A'A} &= \frac{N_p}{V} 2\sqrt{\pi} \left(\frac{2T^*}{M} \right)^{\frac{n-3}{2(n-1)}} \left[\frac{\bar{C}_n}{\hbar} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \right]^{\frac{2}{n-1}} \\ &\times \Gamma\left(\frac{n-3}{n-1}\right) \Gamma\left(\frac{2n-3}{n-1}\right) \\ &\times (1+p^2)^{\frac{1}{n-1}} \sin \left[\frac{2}{n-1} \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{p} \right) \right], \end{aligned} \quad (33.3)$$

тут уведено нове позначення \bar{C}_n ,

$$(\bar{C}_n)^{2/(n-1)} = (C_n^{A'})^{2/(n-1)} - (C_n^A)^{2/(n-1)}. \quad (33.4)$$

Якщо в (33.1) покласти $n = 6$, $p = 0$, то ми отримаємо ван-дер-ваальсівську сталу загасання, яка визначає розширення спектральних ліній атома при його взаємодії з нейтральними частинками середовища без урахування непружного розсіяння:

$$\begin{aligned} \gamma^{\text{WL}} &= \frac{N_p}{V} \left(\frac{C_6}{\hbar} \right)^{2/5} \left(\frac{8T^*}{\pi M} \right)^{3/10} 2\pi \Gamma\left(\frac{3}{5}\right) \Gamma\left(\frac{9}{5}\right) \\ &\times \Gamma^{2/5}\left(\frac{5}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi}{5}\right) \end{aligned} \quad (33.5)$$

або

$$\gamma^{\text{WL}} = 7.901 \frac{N_p}{V} \left(\frac{C_6}{\hbar} \right)^{2/5} \left(\frac{8T^*}{\pi M} \right)^{3/10}. \quad (33.6)$$

Ця формула відома під назвою “сталу загасання в наближенні Вайскопфа–Ліндгольма” [7], чим і зумовлена поява індексу “WL”. Зсув частоти в цьому наближенні

$$\Delta\omega_{A'A} = \frac{N_p}{V} \left(\frac{\bar{C}_6}{\hbar} \right)^{2/5} \left(\frac{8T^*}{\pi M} \right)^{3/10} \pi \Gamma\left(\frac{3}{5}\right) \Gamma\left(\frac{9}{5}\right)$$

$$\times \Gamma^{2/5} \left(\frac{5}{2} \right) \sin \left(\frac{\pi}{5} \right), \quad (33.7)$$

$$\frac{\gamma_{\text{WL}}}{\Delta\omega_{A'A}} = 2 \left(\frac{C_6}{\bar{C}_6} \right)^{2/5} \text{ctg} \left(\frac{\pi}{5} \right) = 2.75276 \left(\frac{C_6}{\bar{C}_6} \right)^{2/5}.$$

Зробимо декілька зауважень до цих формул. По-перше, як правило, при усередненні за швидкостями роблять заміну $\langle v^\nu \rangle$ на $\langle v \rangle^\nu$. Це не дуже змінює числовий коефіцієнт в (33.6), однак ми повинні проводити усереднення за швидкостями згідно з точним означенням (32.1).

У зв'язку з такою неправомірною заміною числове значення коефіцієнта в (33.6) наводять 8.08, замість 7.901 [7]. Це незначне збільшення якраз і відповідає тому, що, згідно з (32.18),

$$\langle v^{3/5} \rangle = \langle v \rangle^{3/5} \Gamma \left(\frac{9}{5} \right) \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/5},$$

і наближена заміна $\langle v^{3/5} \rangle$ на $\langle v \rangle^{3/5}$ означає неврахування множника $\Gamma(9/5)(4/\pi)^{1/5} = 0.97775$ в (33.5), що і веде до збільшення числового значення коефіцієнта з 7.901 до 8.08.

Друге зауваження стосується того, що температурна залежність сталої загасання та зсуву частоти йде через ефективну температуру T^* , яка враховує як теплові, так і мікротурбулентні рухи частинок в атмосфері зорі.

Нарешті, звертаємо особливу увагу на те, що силові константи C_6 та \bar{C}_6 є різними у формулах для сталої загасання $\gamma_{A'A}$ та зсуву частоти $\Delta\omega_{A'A}$. Вони будуть однаковими, якщо вважати, що квазістаціонарність беремо до уваги лише для стану $|A'\rangle$, а стан $|A\rangle$ — стаціонарний. Тобто, коли покласти $C_n^A = 0$, і тоді $C_n = \bar{C}_n = C_n^{A'}$. Таке наближення означає, що лише верхні рівні атома є розширеними, а нижні ні. Узагалі кажучи, це не так, тому для кожної спектральної лінії потрібний акуратний аналіз атомних силових констант $C_n^{A'}$ та C_n^A . Якщо їхні числові значен-

ня є одного порядку, то це веде до збільшення удвічі величини $\gamma_{A'A}$, а зсув частоти стає близьким до нуля.

Дослідники зоряних спектральних ліній для узгодження спостережуваних профілів з теоретично розрахованими часто змушені “руками” збільшувати коефіцієнт в γ^{WL} . Трактують це як неспроможність теорії давати надійні результати для сталої загасання. Однак зауваження, викладені вище, показують, що це не так. Зокрема, потрібно підставляти для C_6 правильні значення з урахуванням розширення як верхніх, так і нижніх рівнів атома.

Додаткове збільшення сталої загасання дають і непружні зіткнення. Як видно з (33.1), при $n = 6$ величина

$$\gamma_{A'A} = \gamma^{WL} (1 + p^2)^{1/5} \frac{\cos \left[\frac{2}{5} \arctg \left(\frac{1}{p} \right) \right]}{\cos \left(\frac{\pi}{5} \right)}. \quad (33.8)$$

Легко бачити, що $\gamma_{A'A} > \gamma^{WL}$. Графік залежності $\gamma_{A'A}/\gamma^{WL}$ від параметра непружних зіткнень p подано на рис. 18.

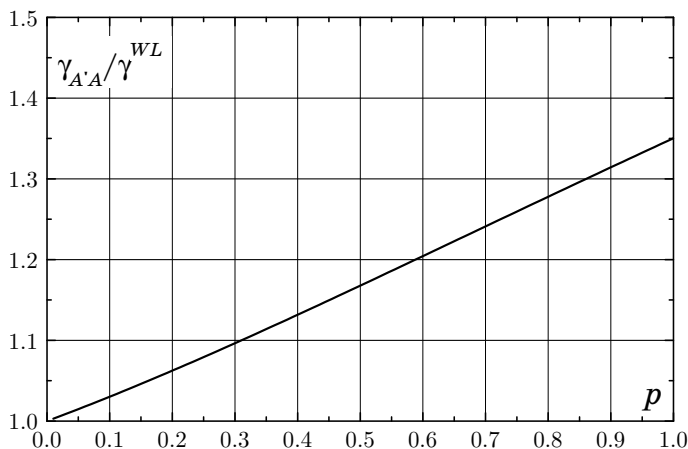


Рис. 18. Залежність ван-дер-ваальсівської сталої загасання від параметра непружних зіткнень.

Ще один механізм збільшення величини $\gamma_{A'A}$ — це постван-дер-ваальсівські взаємодії, які незначно змінюють також і температурну залежність сталої загасання³.

§ 34. Постван-дер-ваальсівське розширення спектральних ліній

Міжчастинкові взаємодії, інтенсивність яких зменшується з відстанню за степеневими законами швидше, ніж $1/r^6$, будемо називати постван-дер-ваальсівськими. Хоча їхній внесок у розширення атомних спектральних ліній значно менший, ніж ван-дер-ваальсівських взаємодій, однак його врахування є важливим при детальному “припасовуванні” експериментальних та теоретичних контурів ліній.

Звернімось до формули (32.21) і випишімо сталу загасання $\gamma_{A'A} = \gamma_{A'} + \gamma_A$ у відношенні до величини $\gamma_{A'A}^0$ з (33.1). Нас цікавитиме температурна залежність $\gamma_{A'A}$, яку створюють постван-дер-ваальсівські взаємодії, тому запишемо ряд для $\gamma_{A'A}$ як розклад за степенями $T^{1/(n-1)}$. Ми не фіксуватимемо показник n степеневого зменшення взаємодій значенням $n = 6$ з тим, що може трапитись потреба вивчати й інші випадки, наприклад, квадратичний ефект Штарка, коли $n = 4$.

Отже, з урахуванням щойно сказаного з (32.21) знаходимо, виділяючи окремо член з $k = 0$:

$$\gamma_{A'A}/\gamma_{A'A}^0 = 1 + \sum_{k \geq 1} \left(\frac{2T^*}{M} \right)^{\frac{k}{n-1}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} \right]^{\frac{2k}{n-1}} \frac{1}{(1+p^2)^{\frac{k}{n-1}}} \times \frac{\Gamma\left(1 + 2\frac{k-1}{n-1}\right)\Gamma\left(2 + \frac{k-1}{n-1}\right) \cos\left[2\frac{k-1}{n-1}\arctg\left(\frac{1}{p}\right)\right]}{\Gamma\left(1 - \frac{2}{n-1}\right)\Gamma\left(2 - \frac{1}{n-1}\right) \cos\left[\frac{2}{n-1}\arctg\left(\frac{1}{p}\right)\right]} \quad (34.1)$$

³Читачеві, якого особливо цікавлять ці питання, рекомендуємо також статтю P. S. Barklem, B. J. O'Mara, J. E. Ross, Mon. Not. R. Astron. Soc. **296**, 1057–1060 (1998), де є посилання й на попередні праці цього циклу.

$$\times \left[\left(\frac{C_n^{A'}}{C_n} \right)^{\frac{2}{n-1}} \frac{a_k(A')}{(C_n^{A'}/\hbar)^{\frac{2k}{n-1}}} + \left(\frac{C_n^A}{C_n} \right)^{\frac{2}{n-1}} \frac{a_k(A)}{(C_n^A/\hbar)^{\frac{2k}{n-1}}} \right],$$

тут для коефіцієнтів a_k з (32.11) ми ввели залежність від номера атомного стану A , $a_k(A) = a_k$, тому що в (32.5) силові константи мають відповідні індекси цих станів. Константа C_n визначена рівнянням (33.2).

Зручно перейти в (34.1) до знерозмірених величин. Як видно з виразу (30.31) для потенціальної енергії атома, величина C_n^A має розмірність “енергія \times відстань в степені n ”. Вимірюватимемо силові константи в атомних одиницях:

$$C_n^A = C_n^{*A} \frac{e^2}{a_B} a_B^n, \quad (34.2)$$

де C_n^{*A} — увільнена від розмірності силова константа, $a_B = \hbar^2/mc^2$ — борівський радіус. З (32.5), (32.11) випливає, що коефіцієнти a_k мають розмірність $\sim C_{n+2k}^A/C_n^A$, тобто пропорційні до a_B^{2k} . Так що вираз в останній квадратній дужці в (34.1) має таку розмірність:

$$a_B^{2k} / \left(\frac{e^2}{\hbar a_B} a_B^n \right)^{\frac{2k}{n-1}} = 1 / \left(\frac{e^2}{\hbar} \right)^{\frac{2k}{n-1}} = \left(\frac{m}{2} / \frac{me^4}{2\hbar^2} \right)^{\frac{k}{n-1}} = \left(\frac{m}{2T_0} \right)^{\frac{k}{n-1}},$$

тут m — маса електрона, і ми ввели масштаб вимірювання температури T_0 , який дорівнює одному рідбергові (нагадуємо Читачеві, що ми домовились вимірювати температуру в енергетичних одиницях),

$$T_0 = 1 \text{ Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} (= 1.578908 \cdot 10^5 \text{ K}). \quad (34.3)$$

Тепер вираз для сталої загасання (34.1) можна записати остаточно як ряд за степенями $(T^*/T_0)^{1/(n-1)}$. Для цього потрібно лише застосувати терпінням до простих перетворень із використанням для Γ -функції її властивості $x\Gamma(x) = \Gamma(x+1)$ і знайти перші

коефіцієнти ряду⁴:

$$\gamma_{A'A}/\gamma_{A'A}^0 = 1 + \sum_{k \geq 1} B_k \left(\frac{T^*}{T_0} \right)^{\frac{k}{n-1}}, \quad (34.4)$$

де

$$B_1 = \left(\frac{C_{n+2}^{*A'}}{C_n^{*A'}} + \frac{C_{n+2}^{*A}}{C_n^{*A}} \right) \times \frac{2D}{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-1}\right) \Gamma\left(\frac{2n-3}{n-1}\right) \cos\left[\frac{2}{n-1} \arctg\left(\frac{1}{p}\right)\right]}, \quad (34.5)$$

$$B_2 = (C_{A'} + C_A) \frac{(n+1) \Gamma\left(\frac{2n-1}{n-1}\right) \Gamma\left(\frac{n+1}{n-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-1}\right) \Gamma\left(\frac{2n-3}{n-1}\right)} D^2, \quad (34.6)$$

.....

$$D = \left(\frac{m}{MC_n^{*2}} \right)^{\frac{1}{n-1}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)} \right]^{\frac{2}{n-1}} \frac{1}{n(1+p^2)^{\frac{1}{n-1}}}, \quad (34.7)$$

$$C_A = \left(\frac{C_n^*}{C_n^{*A}} \right)^{\frac{2}{n-1}} \left[\frac{C_{n+4}^{*A}}{C_n^{*A}} \frac{2n}{n+2} - \left(\frac{C_{n+2}^{*A}}{C_n^{*A}} \right)^2 \right]. \quad (34.8)$$

Як показує простий аналіз з використанням виразів для силових констант C_n^A для конкретних систем, перші коефіцієнти $B_k \lesssim 1/2$.

Характерні температури для зоряної атмосфери, зокрема для Сонця, — $T \sim (4 \div 7) \cdot 10^3$ К, а ефективна температура, яка враховує мікротурбулентні рухи — $T^* \sim \sqrt{2}T$. Звідси з урахуванням (34.3) випливає, що $(T^*/T_0) \sim (4 \div 7) \cdot 10^{-2}$ К. Отже, маємо

⁴Уперше цей вираз без урахування розширення нижніх атомних рівнів знайдено іншим методом у праці: І. О. Вакарчук, Р. Є. Рикалюк, Л. М. Янків-Вітковська. Журн. фіз. досл. **2**, 16–22 (1998).

можливість оцінити чисельно внесок постван-дер-ваальсівських взаємодій у розширення спектральних ліній. Для прикладу на рис. 19 подано залежність відношення $\gamma_{A'A}/\gamma_{A'A}^0$ від температури для $n = 6$ при $B_1 = 1/3$, $B_2 = 1/5$, $B_{k \geq 3} = 0$. Ми обриваємо ряд (34.4) на другому члені згідно з зауваженнями, висловленими після формули (31.4). Крім того, внесок неврахованого “хвоста” цього ряду є незначним унаслідок того, що $T^*/T_0 \sim 10^{-2}$.

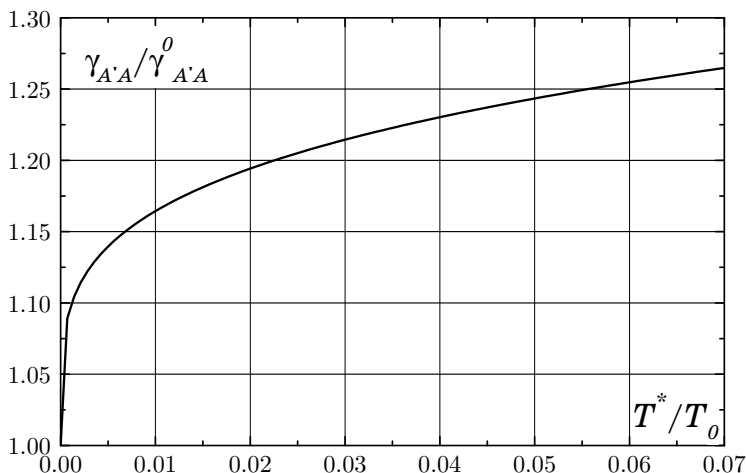


Рис. 19. Температурна залежність внеску постван-дер-ваальсівських взаємодій у сталу загасання.

Аналогічний до (34.1) ряд за степенями $(T^*/T_0)^{1/(n-1)}$ отримуємо з (32.20) також і для зсуву частоти у відношенні до нульового наближення (33.3). Ми не будемо виписувати коефіцієнти цього ряду, оскільки їх просто одержати з коефіцієнтів B_1, B_2, \dots з ряду для сталої загасання (34.4) такими формальними замінами: у перших дужках виразів (34.5), (34.6) знаки “плюс” міняємо на “мінус”, величину C_n з (33.2) — на \bar{C}_n з (33.4), а косинус — на синус.

§ 35. Внесок сил відштовхування у сталу загасання

Досі ми розглядали розширення спектральних ліній лише силами, що мають характер притягання на великих міжчастинкових відстанях, і вважали їх слабкими. Це обґрунтоване наближення, оскільки атмосфера зорі розріджена і ймовірність зіткнень атома зі збурюючими частинками є достатньо малою. Однак якщо відстані між частинками стають (хоча і не часто) порядку їхніх розмірів, то потенціальна енергія взаємодії інтенсивно зростає. Тому важливо також оцінити внесок у сталу загасання і сил відштовхування. Причому внаслідок того, що потенціальна енергія $U_A(r)$ вже не є малою величиною, для фази δ_l користуватись виразом (21.8), отриманим у припущенні слабкості $U_A(r)$, ми не маємо права.

Із цієї ситуації можна вийти з такими міркуваннями. Оскільки сили відштовхування дають внесок лише на малих відстанях, тобто вони входять у гру, коли є фактично пряме зіткнення частинок, то в амплітуді f з (21.6) важливо врахувати лише малі значення орбітального квантового числа l . Маємо протилежний до квазікласичного наближення випадок, коли для сил притягання важливими є великі значення l . Отже, в головному наближенні для сил відштовхування можна обмежитись у f лише першим членом при $l = 0$, або, як кажуть, — s -розсіянням. У результаті для сталої загасання (і зсуву частоти) будемо мати два адитивні внески: від сил відштовхування, згідно з (21.7),

$$\Delta\gamma_A = \frac{4\pi\hbar N_p}{MV} \left\langle \frac{1}{k} \sin^2 \delta_0 \right\rangle, \quad (35.1)$$

$$k = Mv/\hbar$$

і сил притягання (21.13), що ми вже детально розрахували в попередніх параграфах.

Моделювання сил відштовхування різними степеневими залежностями типу $1/r^{12}$, $r \rightarrow 0$, як це є в потенціалі Ленарда-Джонса, не має квантовомеханічного обґрунтування. На наш

погляд, ліпше змоделювати відштовхувальну взаємодію атома зі збурюючою частинкою потенціалом твердих сфер діаметра a : функція $U_A(r)$ дорівнює нулеві при $r > a$ і набуває безмежного значення при $r \leq a$. Прикладом такої взаємодії є зіткнення білярдних куль діаметром a . З умови, що хвильова функція, яка описує стан розсіяних частинок, повинна дорівнювати нулеві при $r = a$, знаходять фазу [8]

$$\delta_0 = -ka. \quad (35.2)$$

Тепер з рівнянь (35.1) та (35.2) отримаємо ту частину сталої загасання γ_A , яку створюють сили відштовхування:

$$\Delta\gamma_A = \frac{4\pi\hbar^2 N_p}{M^2V} \left\langle \frac{\sin^2(Mva/\hbar)}{v} \right\rangle. \quad (35.3)$$

Або, виписуючи означення середнього за швидкостями v з (32.16), маємо:

$$\Delta\gamma_A = \frac{4\pi\hbar^2 N_p}{M^2V} \frac{\int_0^\infty e^{-Mv^2/2T^*} v \sin^2(Mva/\hbar) dv}{\int_0^\infty v^2 e^{-Mv^2/2T^*} dv}. \quad (35.4)$$

Робимо заміну змінних $v = x\sqrt{2T^*/M}$ й інтегруємо за x . Зне- розмірений інтеграл у знаменнику дорівнює $\sqrt{\pi}/4$ і в результаті

$$\Delta\gamma_A = \frac{16\sqrt{\pi}\hbar^2 N_p}{M^2V} \sqrt{\frac{M}{2T^*}} \int_0^\infty e^{-x^2} x \sin^2\left(x \frac{Ma}{\hbar} \sqrt{\frac{2T^*}{M}}\right) dx.$$

Або, інтегруючи частинами, маємо:

$$\Delta\gamma_A = \frac{8\sqrt{\pi}\hbar a N_p}{MV} \int_0^\infty e^{-x^2} \sin(xy) dx, \quad (35.5)$$

де

$$y = \sqrt{8T^* / \frac{\hbar^2}{Ma^2}}. \quad (35.6)$$

Якщо діаметр $a \rightarrow 0$, тобто $y \rightarrow 0$, то розкладаємо синус у ряд, інтеграл дорівнює $y/2$, і отже

$$\Delta\gamma_A = \frac{4\pi a^2 N_p}{V} \langle v \rangle = \frac{4\pi a^2 N_p}{V} \sqrt{\frac{8T^*}{\pi M}}. \quad (35.7)$$

Насправді параметр y для тих температур, які є в зоряній атмосфері, не малий, тому інтеграл у (35.5), що, між іншим, зводиться до інтеграла похибок від уявного аргументу, потрібно розраховувати чисельно.

Зробимо тепер зауваження щодо вибору діаметра твердих сфер a . У § 30 ми торкнулись вимірювання константи взаємодії в потенціалі Ван дер Ваальса в експериментах з розсіяння частинок або з вимірювання в'язкості газів. Інший шлях визначення параметра модельного потенціалу — це обчислення з рівняння стану речовини (залежності тиску від об'єму та температури) другого віріального коефіцієнта і порівняння його з теоретичним виразом. Ми також можемо вирахувати діаметр твердої сфери a з умови, щоб другий віріальний коефіцієнт з деяким модельним потенціалом сил відштовхування $U^A(r)$ збігся з його значенням для потенціалу твердих сфер.

Отже, скориставшись добре відомим виразом для другого віріального коефіцієнта (без множника $1/2$), маємо таку умову:

$$\int_0^\infty \left(1 - e^{-U^A(r)/T}\right) 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi a^3}{3}. \quad (35.8)$$

Наприклад, якщо потенціал $U^A(r)$ має степеневий характер

$$U^A(r) = \frac{C_R}{r^n}, \quad (35.9)$$

де C_R — константа (індекс R від англійського слова *repulsion* — відштовхування), $n > 3$, то з (35.8) маємо

$$\int_0^{\infty} \left(1 - e^{-C_R/Tr^n}\right) r^2 dr = \frac{a^3}{3}$$

або після інтегрування частинами і заміни змінних

$$x = \frac{C_R}{Tr^n}$$

знаходимо

$$a^3 = \left(\frac{C_R}{T}\right)^{3/n} \int_0^{\infty} x^{-3/n} e^{-x} dx,$$

тобто

$$a^3 = \left(\frac{C_R}{T}\right)^{3/n} \Gamma\left(1 - \frac{3}{n}\right).$$

Остаточно

$$a = \left(\frac{C_R}{T}\right)^{1/n} \Gamma^{1/3}\left(1 - \frac{3}{n}\right),$$

маємо слабку залежність діаметра твердих сфер від температури: зі зростанням температури діаметр a зменшується (тому вживають термін “м’які сфери”).

§ 36. Розширення спектральних ліній водню електронами

Як було зазначено при обговоренні формули (32.14), ми повертаємось до проблеми розрахунку тої складової сталюї загасання для атома водню, яка формується зіткненнями з електронами. Суть проблеми полягає в тому, що фаза розсіяння електрона на

нейтральному атомі водню $\delta \sim 1/\rho$, наслідком чого є розбіжність на верхній межі інтеграла (32.2), який визначає зсув енергетичних рівнів та загасання квазістаціонарних атомних станів. Ця розбіжність типова для систем частинок із кулонівською взаємодією, і для її усунення потрібно враховувати багаточастинкові ефекти екранування.

Добре відомо, що заряд, занурений у середовище, екранується і в результаті створений ним потенціал стає короткосяжним. Звернімось до виразу (30.17), який визначає енергію кулонівської взаємодії атома з частинками оточення. Математичний механізм екранування полягає в тому, що коефіцієнт Фур'є кулонівського потенціалу $4\pi/q^2$ замінюється на $4\pi/q^2\varepsilon(q)$, де $\varepsilon(q)$ — діелектрична функція [20]. Для класичного електронного газу діелектрична функція

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{\varkappa_D^2}{q^2}, \quad (36.1)$$

де \varkappa_D — обернений дебаївський радіус екранування, який задано формулою (18.20), причому підсумовування в ній іде за всіма сортами заряджених частинок, у тому числі й за вільними електронами. У результаті оператор \hat{V} з (30.17), що описує взаємодію нейтрального атома з дипольним моментом \mathbf{d} (тобто з узагальненим зарядом $Q(\mathbf{q}) = i\mathbf{q}\mathbf{d}$) зі збуджуючою частинкою, яка має заряд $Q_a = e$, з урахуванням (36.1), дорівнюватиме:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{V} \sum_q \frac{4\pi Q(\mathbf{q})Q_a(-\mathbf{q})}{q^2\varepsilon(q)} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a)} \\ &= \frac{1}{V} \sum_q \frac{4\pi Q_a i(\mathbf{q}\mathbf{d})}{q^2\varepsilon(q)} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a)} \\ &= (\mathbf{d}\nabla)Q_a \frac{1}{V} \sum_q \frac{4\pi}{q^2\varepsilon(q)} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a)} \\ &= (\mathbf{d}\nabla)Q_a \frac{1}{V} \sum_q \frac{4\pi}{q^2 + \varkappa_D^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a)} \end{aligned}$$

$$= (\mathbf{d}\nabla)Q_a \frac{e^{-\varkappa_D |\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|}}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|}.$$

Або після обчислення градієнта, замість неекранованого потенціалу (30.15), будемо мати:

$$\hat{V} = e \frac{\mathbf{d}(\mathbf{R}_a - \mathbf{R})}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|^3} \left(1 + \varkappa_D |\mathbf{R} - \mathbf{R}_a| \right) e^{-\varkappa_D |\mathbf{R} - \mathbf{R}_a|}. \quad (36.2)$$

Якщо $\varkappa_D \rightarrow 0$, то екранування відсутнє і цей вираз переходить у (30.15).

Тепер, маючи явний вираз (36.2) для \hat{V} і повторюючи міркування, які привели нас з (30.15) до (30.23), знаходимо енергію взаємодії атома водню з електроном у середовищі, тобто з урахуванням ефектів екранування:

$$U_A(r) = -\frac{3}{2}e^2 a_B \frac{n(n_1 - n_2)}{r^2} (1 + \varkappa_D r) e^{-\varkappa_D r}, \quad (36.3)$$

тут позначення такі ж, як у формулі (30.23).

Надалі будемо вважати, що густина заряджених частинок в атмосфері зорі є достатньо малою і доданок, пропорційний до \varkappa_D , у виразі (36.3) буде несуттєвим, оскільки в остаточному результаті його внесок зникатиме при $\varkappa_D \rightarrow 0$. Таким чином, покладаємо, що

$$U_A(r) = -\frac{C_2^A}{r^2} e^{-\varkappa_D r}, \quad (36.4)$$

$$C_2 = \frac{3}{2}e^2 a_B n(n_1 - n_2).$$

При обчисленні фази розсіяння δ із цим потенціалом за формулою (21.10) прийдемо до виразу (31.2), у якому під інтегралом будемо мати додатковий множник $\exp(-\varkappa_D \rho / \sqrt{x})$. Оскільки головний внесок при інтегруванні за x буде йти від значень $x \sim 1$, то цей експоненційний множник, за теоремою про середнє, винесемо з-під інтеграла при $x = 1$ і знайдемо, що

$$\delta = \frac{\pi C_2^A}{v \hbar \rho} e^{-\varkappa_D \rho}. \quad (36.5)$$

Отже, внаслідок ефектів екранування фаза δ швидко зменшується зі зростанням відстані ρ і згадані вище розбіжності зникатимуть. Звертаємось тепер до формули (21.13) і для зсуву енергій та сталої загасання знову одержуємо вираз (32.1), у якому інтеграл

$$I = 2\pi \int_0^{\infty} \left[1 - \exp \left(-z \frac{\pi C_2^A}{v\hbar\rho} e^{-\varkappa_D \rho} \right) \right] \rho d\rho.$$

Уведемо нову змінну інтегрування t , $\rho = t\pi z C_2^A / v\hbar$, і в результаті

$$I = 2\pi \left(\frac{\pi z C_2^A}{v\hbar} \right)^2 \int_0^{\infty} t \left[1 - \exp \left(-\frac{e^{-\varepsilon t}}{t} \right) \right] dt, \quad (36.6)$$

де

$$\varepsilon = \frac{\pi z C_2^A}{v\hbar} \varkappa_D. \quad (36.7)$$

Наше завдання — знайти значення інтеграла в (36.6) при $\varepsilon \rightarrow 0$, оскільки, внаслідок розрідженості атмосфери зорі, екранування є слабким, тобто $\varkappa_D \rightarrow 0$. Звичайний розклад підінтегральної функції за степенями ε веде до розбіжностей (ознака неаналітичності), і тому потрібний хитріший аналіз величини I . Ми не будемо зупинятись на деталях обчислення цього інтеграла і відсилаємо Читача до [20], де такий інтеграл виник при обчисленні середньої енергії класичного електронного газу. Там знайдено вираз для нього при $\varepsilon \rightarrow 0$. Отже, виписуємо результат⁵:

$$I = 2\pi \left(\frac{\pi z C_2^A}{v\hbar} \right)^2 \left[\frac{1}{\varepsilon} + \ln \gamma - \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \ln(2\varepsilon) \right], \quad (36.8)$$

⁵Якщо Читач не бажає з'ясувати всі тонкощі “витягування” з I неаналітичності за ε , то пропонуємо оціночний підхід (як для звичайного пішохода): замість екранованого потенціалу в (36.5) беремо кулонівський ($\varkappa_D = 0$), але обмежуємо його дію дебаївським радіусом $1/\varkappa_D$. Елементарні перетворення в інтегралі за ρ із заміною змінних інтегрування дають ($p = 0$, $z = -i$):

$$I = 2\pi (\pi C_2^A / v\hbar)^2 \left[\int_{x_D}^{\infty} dx (1 - \cos x) / x^3 - i \int_{x_D}^{\infty} dx \sin x / x^3 \right],$$

де $\ln \gamma = 0.577215664$ — стала Ейлера.

Виконаймо, згідно з (21.13), усереднення за швидкостями:

$$\langle vI \rangle = 2\pi \left(\frac{\pi z C_2^A}{\hbar} \right)^2 \quad (36.9)$$

$$\times \left[\frac{\hbar}{\pi z C_2^A \varkappa_D} + \left(\ln \gamma - \frac{3}{4} \right) \left\langle \frac{1}{v} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2v} \ln \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{v\hbar} \right) \right\rangle \right].$$

З (32.18)

$$\left\langle \frac{1}{v} \right\rangle = \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}},$$

а

$$\left\langle \frac{1}{2v} \ln \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{v\hbar} \right) \right\rangle = \frac{\frac{1}{2} \int_0^\infty v \ln \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{v\hbar} \right) e^{-Mv^2/2T^*} dv}{\int_0^\infty v^2 e^{-Mv^2/2T^*} dv}. \quad (36.10)$$

Інтеграл у знаменнику в (36.10) дорівнює $(2T^*/M)^{3/2} \sqrt{\pi}/4$, а в чисельнику замінюємо змінну інтегрування: $v = 2\pi z C_2^A \varkappa_D \sqrt{x}/\hbar$.

У результаті:

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{1}{2v} \ln \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{v\hbar} \right) \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{M}{2T^*} \right)^{3/2} \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{\hbar} \right)^2 \int_0^\infty e^{-\mu x} \ln x dx, \quad (36.11) \end{aligned}$$

$$\mu = \frac{M}{2T^*} \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{\hbar} \right)^2. \quad (36.12)$$

$x_D = \pi C_2^A \varkappa_D / v\hbar$. Інтегруємо частинами і виділяємо головні внески при $x_D \ll 1$: перший інтеграл зводимо до інтегрального косінуса [19] з асимптотикою $(-\ln x_D)/2$, а другий у цій межі дає $1/x_D$. Отже, ведучі члени цієї асимптотики збігаються з (36.8).

Інтеграл, що виник тут, є табличним (перетворення Лапласа) [29]:

$$\int_0^{\infty} e^{-\mu x} \ln x dx = -\frac{1}{\mu} \ln(\gamma\mu), \quad \text{Re } \mu > 0,$$

стала Ейлера $\gamma = 1.781072418$.

Остаточно для середнього (36.11) маємо

$$\left\langle \frac{1}{2v} \ln \left(\frac{2\pi z C_2^A \varkappa_D}{v\hbar} \right) \right\rangle = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{M}{2T^*}} \ln(\gamma\mu).$$

З урахуванням цього середнє (36.9) дорівнює

$$\begin{aligned} \langle vI \rangle &= 2\pi \left(\frac{\pi z C_2^A}{\hbar} \right)^2 \\ &\times \left\{ \frac{\hbar}{\pi z C_2^A \varkappa_D} + \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \left[\ln \gamma - \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \ln(\gamma\mu) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (36.13)$$

Підставляємо цей вираз у формулу (21.13), яка визначає зсув енергетичного рівня і сталу загасання атомного стану:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \Delta E_A + \frac{\gamma_A}{2} &= 2\pi \frac{N_e}{V} \left(\frac{\pi C_2^A}{\hbar} \right)^2 \\ &\times \left\{ \frac{z\hbar}{\pi C_2^A \varkappa_D} + \frac{z^2}{4} \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \left[5 \ln \gamma - 3 + 2 \ln \left(\frac{2\pi z |C_2^A| \varkappa_D}{\hbar} \sqrt{\frac{M}{2T^*}} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (36.14)$$

Пригадаймо, що величина z , згідно з (32.3), дорівнює $z = p - i$, де p — параметр непружних зіткнень. Нехтуючи внеском непружних зіткнень ($p = 0$) і виділяючи у правій частині рівняння (36.14) з урахуванням (36.12) дійсну і уявну частини, знаходимо:

$$\frac{\Delta E_A}{\hbar} = -2\pi \frac{N_e}{V} \left(\frac{\pi C_2^A}{\hbar} \right)^2 \left(\frac{\hbar}{\pi C_2^A \varkappa_D} - \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \right), \quad (36.15)$$

$$\gamma_A = \pi \frac{N_e}{V} \left(\frac{\pi C_2^A}{\hbar} \right)^2 \quad (36.16)$$

$$\times \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \left[3 - 5 \ln \gamma - 2 \ln \left(\frac{2\pi |C_2^A| \varkappa_D}{\hbar} \sqrt{\frac{M}{2T^*}} \right) \right].$$

Перші два доданки в квадратних дужках у формулі (36.16) дають у сумі 0.1139217, а логарифм, зважаючи на нашу умову $|\mu| < 1$ (тому що обернений радіус Дебая \varkappa_D — мала величина), є від'ємним, і тому стала загасання $\gamma_A > 0$, зсув ΔE_A залежить від знака C_2^A . Для того, щоб знайти складову сталої загасання спектральних ліній атома водню, яку створюють його зіткнення з вільними електронами, потрібно додати вирази (36.16) для нижнього та верхнього станів із квантовими числами A та A' .

Внесок непружних зіткнень у сталу загасання та зсув енергетичних рівнів атома легко знаходимо з (36.14), урахуваючи вираз (32.19) для величини z :

$$\frac{\Delta E_A}{\hbar} = -2\pi \frac{N_e}{V} \left(\frac{\pi C_2^A}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{\hbar \sqrt{1+p^2}}{\pi C_2^A \varkappa_D} \sin \varphi \right.$$

$$+ \frac{(1+p^2)}{2} \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \varphi \cos 2\varphi + \frac{(1+p^2)}{4} \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \sin 2\varphi \quad (36.17)$$

$$\left. \times \left[5 \ln \gamma - 3 + 2 \ln \left(\frac{2\pi |C_2^A| \varkappa_D}{\hbar} \sqrt{\frac{M(1+p^2)}{2T^*}} \right) \right] \right\},$$

$$\gamma_A = 4\pi \frac{N_e}{V} \left(\frac{\pi C_2^A}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{\hbar \sqrt{1+p^2}}{\pi C_2^A \varkappa_D} \cos \varphi + \frac{(1+p^2)}{4} \sqrt{\frac{2M}{\pi T^*}} \right. \quad (36.18)$$

$$\left. \times \left(\left[5 \ln \gamma - 3 + 2 \ln \left(\frac{2\pi |C_2^A| \varkappa_D}{\hbar} \sqrt{\frac{M(1+p^2)}{2T^*}} \right) \right] \cos 2\varphi - 2\varphi \sin 2\varphi \right) \right\},$$

де $\varphi = \arctg(1/p)$, $-\pi/2 < \varphi \leq \pi/2$.

При $p = 0$ ці вирази переходять у (36.15), (36.16).

РОЗДІЛ VI

КОЕФІЦІЄНТ НЕПЕРЕРВНОГО ПОГЛИНАННЯ

§ 37. Сили осцилятора атома водню для зв'язано-вільних переходів. Борнівське наближення

Вираз для коефіцієнта поглинання (6.6), як ми зазначали, має загальний характер, що дає змогу розрахувати й коефіцієнт неперервного поглинання. Для цього нам необхідно передусім розшифрувати, що означає в (6.6) підсумовування за каналами реакцій та підсумовування за частинками. За означенням, внесок у коефіцієнт неперервного поглинання дають квантові переходи електрона із зв'язаних станів в атомі у вільні стани з неперервним значенням енергії (фотоефект) та переходи з одного вільного стану в інший. Отже, підсумовування за каналами реакцій у (6.6) означає, що необхідно взяти до уваги два елементарні процеси (1.2) та (1.3): зв'язано-вільні та вільно-вільні переходи. Підсумовування за частинками — це підсумовування за частинками певного сорту з наступним підсумовуванням за сортами.

Головний внесок у неперервне поглинання дають атом водню та його йони (від'ємний йон водню H^- та молекулярний йон водню H_2^+), оскільки водню в атмосфері зорі є на декілька порядків більше, ніж атомів інших елементів. Помітним джерелом непрозорості атмосфери зорі є й атоми гелію. Ми повинні послідовно розглянути внесок кожного каналу реакції й кожного сорту частинок.

Насамперед дослідимо внесок у неперервне поглинання атомів водню. Центральним моментом теорії є розрахунок сил осциляторів $f_{A'A}$ у виразі (6.6).

Розрахуймо силу осцилятора водневоподібного атома, ядро якого має заряд Z , для переходу електрона з основного $|1s\rangle$ -стану в незв'язаний стан з імпульсом $\hbar\mathbf{k}^1$.

Розгляньмо спочатку борнівське наближення², а пізніше подамо точний вираз для $f_{A'A}$. Борнівське наближення — це коли за хвильову функцію з неперервним спектром енергій беремо плоску хвилю де Бройля і, таким чином, приймаємо, що:

$$|A\rangle = |1s\rangle = \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{Z}{a_B}r}, \quad (37.1)$$

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

$$|A'\rangle = |\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (37.2)$$

Наближену хвильову функцію неперервного спектра нормуємо на макроскопічний об'єм V , тому хвильовий вектор \mathbf{k} є квазідискретним.

Для розрахунку сили осцилятора беремо її вихідний вираз (11.5). Ще раз нагадуємо, що при використанні наближених хвильових функцій наведені вище точні вирази (11.5) та (11.7) для сил осциляторів можуть давати, узагалі кажучи, різні результа-

¹Раніше (див. розділи I–III) через \mathbf{k} ми позначали хвильовий вектор фотона. Тут величину \mathbf{k} вводимо як хвильовий вектор електрона, що задає його квантовий стан для неперервних значень енергій. Це не повинно приводити до непорозумінь — коли ж ні, то Читач змусив би нас вживати різні фарби для хвильових векторів фотона та електрона, як це робили староіндійські математики для багатьох невідомих в алгебраїчних рівняннях.

²Назва походить від прізвища німецького фізика-теоретика Макса Борна (1882–1970) — одного з творців квантової механіки, який дав інтерпретацію хвильової функції, а в 1926 році розробив наближений метод розрахунку задач квантовомеханічної теорії розсіяння (борнівське наближення). Визнання його внеску у квантову механіку нагородженням Нобелівською премією 1954 року було дещо запізнілим.

ти. Отже,³

$$f_{1s \rightarrow \mathbf{k}} = \frac{2}{3m\hbar\omega} |\langle \mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | 1s \rangle|^2, \quad (37.3)$$

ω — частота переходу,

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_{1s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \quad (37.4)$$

— айнштайнівський закон фотоефекту.

Уведемо граничну частоту фотоефекту

$$\omega_c = \frac{Z^2 e^2}{2a_B \hbar} = \frac{\hbar Z^2}{2ma_B^2}, \quad (37.5)$$

$$\frac{\omega}{\omega_c} = 1 + q^2,$$

де знерозмірений хвильовий вектор

$$q = ka_B/Z.$$

Якщо частота ω менша за граничну частоту ω_c , то сила осцилятора, очевидно, дорівнює нулеві, як це впливає із закону збереження енергії:

$$f_{1s \rightarrow \mathbf{k}} = 0, \omega < \omega_c. \quad (37.6)$$

Отже, потрібний нам матричний елемент

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | 1s \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi V}} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (-i\hbar \nabla) e^{-Zr/a_B} d\mathbf{r}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi V}} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} \mathbf{I}, \end{aligned} \quad (37.7)$$

³Щодо позначень сил осцилятора див. виноску на с. 135.

де інтеграл

$$\begin{aligned}
 \mathbf{I} &= i\hbar \frac{Z}{a_B} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{r} e^{-Zr/a_B} d\mathbf{r} \\
 &= \frac{\hbar Z}{a_B} (-\nabla_{\mathbf{k}}) \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{e^{-Zr/a_B}}{r} d\mathbf{r} \\
 &= -\frac{\hbar Z}{a_B} \nabla_{\mathbf{k}} \frac{4\pi}{k^2 + (Z/a_B)^2} = \frac{8\pi\hbar\mathbf{k}Z/a_B}{[k^2 + (Z/a_B)^2]^2}. \quad (37.8)
 \end{aligned}$$

Тут ми тимчасово ввели позначення $\nabla_{\mathbf{k}}$ для оператора ґрадієнта в \mathbf{k} -просторі. Звертаємо увагу також на те, що у виразах (37.7), (37.8) величина $d\mathbf{r}$ не є вектором, а, як і раніше, символічно позначає елемент об'єму: $d\mathbf{r} = dx dy dz$. Таким чином,

$$\langle \mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | 1s \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi V}} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} \frac{8\pi\hbar\mathbf{k}Z/a_B}{[k^2 + (Z/a_B)^2]^2}. \quad (37.9)$$

Або записаний через знерозмірений хвильовий вектор матричний елемент

$$\langle \mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | 1s \rangle = \sqrt{\frac{a_B}{\pi ZV}} \frac{8\pi\hbar\mathbf{q}}{(1+q^2)^2}. \quad (37.10)$$

Тепер сила осцилятора

$$\begin{aligned}
 f_{1s \rightarrow \mathbf{k}} &= \frac{2a_B}{3m\hbar\omega ZV} \frac{64\pi\hbar^2 q^2}{(1+q^2)^4} \\
 &= \frac{2^8}{3} \frac{\pi}{V} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^3 \frac{\omega_c}{\omega} \frac{q^2}{(1+q^2)^4}, \quad (37.11)
 \end{aligned}$$

а записана через частоту переходу вона має такий вигляд:

$$f_{1s \rightarrow \mathbf{k}} = \frac{2^8}{3} \frac{\pi}{V} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^3 \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^5 \left(\frac{\omega}{\omega_c} - 1 \right), \quad \omega < \omega_c. \quad (37.12)$$

Як ми вже неодноразово говорили раніше, при переході від дискретних значень хвильового вектора \mathbf{k} до неперервних підсумовування замінюємо інтегруванням:

$$\sum_{\mathbf{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{\infty} k^2 dk. \quad (37.13)$$

Отже, коли ми хочемо відшукати силу осцилятора для неперервних значень хвильового вектора, вираз (37.11) потрібно перенормувати так:

$$f_{1s \rightarrow \mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 f_{1s \rightarrow \mathbf{k}}. \quad (37.14)$$

У результаті нормована на неперервний спектр сила осцилятора остаточно дорівнює

$$f_{1s \rightarrow k} = \begin{cases} \frac{2^7 a_B}{3\pi Z} \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^5 \left(\frac{\omega}{\omega_c} - 1\right)^2, & \omega \geq \omega_c. \\ 0, & \omega < \omega_c. \end{cases} \quad (37.15)$$

У зв'язку з отриманим виразом нам залишилось лише наголошувати, що борнівське наближення добре працює при великих значеннях імпульсу електрона $\hbar\mathbf{k}$, а отже, при великих значеннях частоти ω , як це випливає із закону Айнштайна для явища фотоефекту (37.4). Із формули (37.15) робимо важливий висновок: для великих значень частоти ω сила осцилятора $f_{1s \rightarrow k} \sim 1/\omega^3$. Цей закон зменшення зі зростанням частоти ми використали у § 28 при “конструюванні” квазікласичного наближення для сил осцилятора.

§ 38. Точний розрахунок сили осцилятора атома водню для переходу з K -оболонки в неперервний спектр

Використаймо тепер для розрахунку сил осцилятора точні хвильові функції атома водню для неперервного спектра:

$$|A'\rangle = |k, l, m\rangle = \psi_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (38.1)$$

Радіальна складова хвильової функції $R_{kl}(r)$ задовольняє те ж рівняння Шрединґера, що і хвильові функції дискретного спектра $R_{nl}(r)$. Причому власні значення енергії дискретного спектра $(-Z^2e^2/2a_B n^2)$ замінюємо на “власні” значення енергії неперервного спектра $\hbar^2 k^2/2m$, які отримуємо з попереднього, якщо зробимо формальну заміну [8]

$$n = \frac{Z}{ika_B}. \quad (38.2)$$

Тому для одержання хвильових функцій $R_{kl}(r)$ необхідно функції $R_{nl}(r)$ аналітично продовжити на уявні значення n і відповідно пронормувати $R_{kl}(r)$ уже на δ -функцію:

$$\int_0^\infty R_{k'l}(r)R_{kl}(r)r^2 dr = \delta(k - k'). \quad (38.3)$$

У результаті такої заміни константи нормування хвильових функцій стають іншими. По-перше, внаслідок нормування на δ -функцію вони набувають додаткового множника $1/\sqrt{1 - e^{-2\pi|n|}}$ (див. [24]). По-друге, функції дискретного спектра задовольняють умову

$$\sum_n r' R_{nl}(r')r R_{nl}(r) = \delta(r - r'). \quad (38.4)$$

Отже, при переході до неперервних значень $|n|$ робимо таку заміну для підсумовування за головним квантовим числом:

$$\sum_n \rightarrow \int d|n| = \int_0^\infty \frac{Z}{a_B} d\left(\frac{1}{k}\right) = - \int_0^\infty \frac{Z}{a_B k^2} dk. \quad (38.5)$$

Таким чином, до кожної хвильової функції з неперервного спектра потрібно “причепити” ще множник $\sqrt{-Z/a_B k^2}$.

Тому всі матричні елементи для переходів із дискретного в неперервний спектр необхідно помножити ще на величину

$$\sqrt{-Z/a_B k^2} = \sqrt{-a_B |n|^2/Z},$$

оскільки перенормуємо лише хвильову функцію неперервного спектра. Зі сказаного вище виходить такий результат:

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{l} \text{Матричний елемент} \\ \text{переходу з дискретного} \\ \text{спектра в неперервний} \\ m \rightarrow k \end{array} \right) = \sqrt{-\frac{a_B}{Z} |n|^2} \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2\pi|n|}}} \\ & \times \left(\begin{array}{l} \text{Матричний елемент} \\ \text{переходу в дискретному} \\ \text{спектрі } m \rightarrow n \text{ із заміною} \\ n \rightarrow -i|n|, |n| = Z/ka_B \end{array} \right). \end{aligned} \quad (38.6)$$

Розгляньмо перехід з K -оболонки в неперервний спектр. Символічно запишемо цей перехід так: $|1s\rangle \rightarrow |kp\rangle$. Ми зберігаємо і тут індекс p для стану з орбітальним квантовим числом $l = 1$. Раніше (див. (26.19)) було отримано для $|1s\rangle \rightarrow |np\rangle$ -переходу матричний елемент

$$r_{n1,10} = 2^4 \frac{a_B}{Z} \sqrt{\frac{(n-1)^{2n-5} n^7}{(n+1)^{2n+5}}}.$$

Тому для нашого випадку, здійснюючи аналітичне продовження на уявні значення головного квантового числа, знаходимо

$$r_{k1,10} = \sqrt{-\frac{a_B}{Z} |n|^2} \frac{1}{1 - e^{-2\pi|n|}} 2^8 \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 n^7 \frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}, \quad (38.7)$$

де

$$n = -i|n|, \quad |n| = 1/q, \quad q = ka_B/Z.$$

Далі виконуємо прості вправи:

$$[(n+1)(n-1)]^5 = (n^2 - 1)^5 = (-|n|^2 - 1)^5 = -(1 + |n|^2)^5, \quad (38.8)$$

$$\begin{aligned}
 (n-1)^2 &= -|n|^2 + 2i|n| + 1 = \sqrt{(1-|n|^2)^2 + 4|n|^2} e^{i\varphi} \\
 &= (1+|n|^2) e^{i\varphi},
 \end{aligned} \tag{38.9}$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{2|n|}{1-|n|^2}, \tag{38.10}$$

$$(n+1)^2 = (1+|n|^2) e^{-i\varphi},$$

отже,

$$\frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} = -\frac{e^{2|n|\varphi}}{(1+|n|^2)^5}. \tag{38.11}$$

Фаза $\varphi \rightarrow 0$ при $|n| \rightarrow \infty$, тому з

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{2 \operatorname{tg} \varphi / 2}{1 - \operatorname{tg}^2 \varphi / 2}$$

маємо

$$\operatorname{tg} \frac{\varphi}{2} = -\frac{1}{|n|},$$

тобто

$$\frac{\varphi}{2} = -\operatorname{arccctg} |n| = -\operatorname{arccctg} \frac{1}{q}.$$

Остаточно знаходимо:

$$|r_{k1,10}|^2 = 2^8 \left(\frac{a_B}{Z} \right)^3 \frac{|n|^9}{(1+|n|^2)^5} \frac{e^{-\frac{4}{q} \operatorname{arccctg} (1/q)}}{1 - e^{-2\pi/q}}. \tag{38.12}$$

Тепер сила осцилятора

$$f_{1s \rightarrow kp} = \frac{2}{3} \frac{m\omega}{\hbar} |r_{k1,10}|^2$$

з урахуванням закону фотоефекту (37.5) дорівнює

$$f_{1s \rightarrow kp} = \frac{2^8 a_B}{3 Z} \frac{q}{(1+q^2)^4} \frac{e^{-\frac{4}{q} \operatorname{arccctg} (1/q)}}{1 - e^{-2\pi/q}}, \tag{38.13}$$

$$q = ka_B/Z = \sqrt{\omega/\omega_c - 1}.$$

Перепишучи частково цей вираз через частоту переходу, у кінцевому підсумку маємо:

$$f_{1s \rightarrow kp} = \begin{cases} \frac{2^8 a_B}{3 Z} \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^4 \left(\frac{\omega}{\omega_c} - 1\right)^{1/2} \frac{e^{-\frac{4}{q} \operatorname{arctg}(1/q)}}{1 - e^{-2\pi/q}}, & \omega \geq \omega_c \\ 0, & \omega < \omega_c. \end{cases} \quad (38.14)$$

Розгляньмо тепер граничні випадки. При великих частотах ($q \rightarrow \infty$), коли працює борнівське наближення, маємо

$$\frac{e^{-\frac{4}{q} \operatorname{arctg}(1/q)}}{1 - e^{-2\pi/q}} \underset{q \rightarrow \infty}{=} \frac{q}{2\pi} \quad (38.15)$$

і

$$f_{1s \rightarrow kp} = \frac{2^8 a_B}{3 Z} \frac{1}{2\pi} \frac{q^2}{(1 + q^2)^4} \underset{q \rightarrow \infty}{=} \frac{2^7 a_B}{3\pi Z} \frac{1}{q^6}. \quad (38.16)$$

Тобто для $q = \omega/\omega_c \gg 1$:

$$f_{1s \rightarrow kp} = \frac{2^7 a_B}{3\pi Z} \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3. \quad (38.17)$$

Цей вираз збігається з отриманим раніше виразом (37.15) для сили осцилятора в борнівському наближенні, якщо в ньому покласти $\omega \gg \omega_c$.

В околі червоної межі фотоефекту ($q \rightarrow 0$) легко перевідчитись, що

$$\frac{e^{-\frac{4}{q} \operatorname{arctg}(1/q)}}{1 - e^{-2\pi/q}} \underset{q \rightarrow 0}{=} e^{-4}, \quad (38.18)$$

а сила осцилятора

$$f_{1s \rightarrow kp} = \left(\frac{4}{e}\right)^4 \frac{a_B}{3Z} q = \left(\frac{4}{e}\right)^4 \frac{a_B}{3Z} \sqrt{\frac{\omega}{\omega_c} - 1}, \quad (38.19)$$

$$\omega \gtrsim \omega_c,$$

тут величина e — це основа натуральних логарифмів. На завершення, як це було задекларовано в кінці § 26, обчислимо (за допомогою (38.13)) внесок неперервного спектра в правило сум для сил осцилятора при квантовому переході з $1s$ -стану:

$$\int_0^{\infty} f_{1s \rightarrow kp} dk = \frac{2^8}{3} \int_0^{\infty} \frac{q}{(1+q^2)^4} \frac{e^{-\frac{4}{q} \arctg(1/q)}}{1 - e^{-2\pi/q}} dq. \quad (38.20)$$

Комп'ютерний розрахунок інтеграла за q дає

$$\int_0^{\infty} f_{1s \rightarrow kp} dk = 0.434996. \quad (38.21)$$

Це числове значення ми використали й у § 26. Його потрібно додати до внеску дискретного спектра (26.23), щоб знайти повний вираз для суми осцилятора:

$$\sum_{n=2}^{\infty} f_{np,1s} + \int_0^{\infty} f_{1s \rightarrow np} dk = 0.565004 + 0.434996 = 1. \quad (38.22)$$

Як і повинно бути, ми отримали одиницю, і це ще раз підтверджує правильність наших розрахунків.

§ 39. Сили осцилятора для вільно-вільних переходів. Борнівське наближення

Перекинемо тепер нашу увагу на електронні вільно-вільні переходи. Перед нами знов стоїть завдання знайти відповідні сили осцилятора.

Електрон рухається в полі йонів, які створюють у точці його знаходження \mathbf{r} потенціал, так що енергія електрон-йонної взаємодії

$$\Phi(r) = - \sum_{j=1}^{N_i} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|}. \quad (39.1)$$

Уважаємо взаємодію електронів з йонами кулонівською, а позначення тут такі: $|e|Z_j$ — заряд йона сорту j , N_i — кількість йонів, \mathbf{R}_j — j -това координата йона.

Хвильова функція електрона за стандартною квантовомеханічною теорією збурень у борнівському наближенні

$$|A\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \sum_{\mathbf{p}} \frac{\langle \mathbf{p} | \Phi(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle}{\hbar^2 k^2 / 2m - \hbar^2 p^2 / 2m} |\mathbf{p}\rangle + \dots, \quad (39.2)$$

$(\mathbf{p} \neq \mathbf{k})$

де

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}$$

— плоска хвиля де Бройля.

Ми розглядаємо переходи з початкового стану, коли електрон має імпульс $\hbar\mathbf{k}$, у кінцевий стан з імпульсом $\hbar\mathbf{k}'$, причому $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$. Потрібна нам сила осцилятора

$$f_{A'A} = \frac{2}{3m\hbar\omega} \left| \langle A' | \hat{\mathbf{p}} | A \rangle \right|^2, \quad (39.3)$$

де матричний елемент

$$\begin{aligned} \langle A' | \hat{\mathbf{p}} | A \rangle &= \langle \mathbf{k}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{k} \rangle + \sum_{\mathbf{p}} \frac{\langle \mathbf{p} | \Phi | \mathbf{k} \rangle}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 p^2}{2m}} \langle \mathbf{k}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p} \rangle \\ &+ \sum_{\mathbf{p}} \frac{\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{p} \rangle}{\hbar^2 k'^2 / 2m - \hbar^2 p^2 / 2m} \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{k} \rangle \\ &+ \text{(члени вищого порядку мализни за } \Phi \text{)}. \end{aligned} \quad (39.4)$$

Далі за означенням

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{k} \rangle &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} (-i\hbar\nabla) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} d\mathbf{r} \\ &= \hbar\mathbf{k} \frac{1}{V} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \hbar\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (39.5)$$

Тому в лінійному наближенні за Φ матричний елемент

$$\begin{aligned} \langle A' | \hat{\mathbf{p}} | A \rangle &= \hbar \mathbf{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \hbar \mathbf{k}' \frac{\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle}{\hbar^2 k^2 / 2m - \hbar^2 k'^2 / 2m} \\ &+ \hbar \mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle}{\hbar^2 k'^2 / 2m - \hbar^2 k^2 / 2m}. \end{aligned} \quad (39.6)$$

Отже, оскільки $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$, то звідси остаточно маємо:

$$\langle A' | \hat{\mathbf{p}} | A \rangle = \hbar(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle}{\hbar^2 k^2 / 2m - \hbar^2 k'^2 / 2m}, \quad (39.7)$$

$$\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'.$$

Тепер сила осцилятора

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2}{3m\hbar\omega} \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^2 \left| \langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \frac{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}{(k^2 - k'^2)^2}. \quad (39.8)$$

Причому оскільки виконується закон збереження енергії,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega = 0,$$

то

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2}{3m\hbar\omega^3} \left| \langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle \right|^2 (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2. \quad (39.9)$$

Підрахуємо матричний елемент:

$$\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle = - \sum_{j=1}^{N_i} \left\langle \mathbf{k}' \left| \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|} \right| \mathbf{k} \right\rangle, \quad (39.10)$$

$$\left\langle \mathbf{k}' \left| \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|} \right| \mathbf{k} \right\rangle = Z_j e^2 \frac{1}{V} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Заміна $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}_j$ дає:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|} | \mathbf{k} \rangle &= Z_j e^2 \frac{1}{V} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}_j} \int \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}'}}{r'} d\mathbf{r}' \\ &= \frac{Z_j e^2}{V} \frac{4\pi}{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}_j}. \end{aligned} \quad (39.11)$$

Отже, шуканий матричний елемент

$$\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle = -\frac{4\pi e^2}{V |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2} \sum_{j=1}^{N_i} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}_j} Z_j. \quad (39.12)$$

Для простоти далі розгляньмо йони одного сорту ($Z_j = Z$):

$$\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle = -\frac{4\pi e^2 Z \sqrt{N_i}}{V |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2} \rho_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}, \quad (39.13)$$

де величина

$$\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \sum_{j=1}^{N_i} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad \rho_{\mathbf{q}}^* = \rho_{-\mathbf{q}} \quad (39.14)$$

є спеціально нормованим коефіцієнтом Фур'є локальної флюктуації густин йонів. Таким чином, сила осцилятора

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2}{3m\hbar\omega^3} (4\pi e^2 Z)^2 \frac{N_i}{V^2} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} |\rho_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}|^2$$

або остаточно борнівське наближення для сили осцилятора

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2^5 \pi^2 e^4 Z^2}{3m\hbar\omega^3} \frac{N_i}{V^2} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} |\rho_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}|^2, \quad \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'. \quad (39.15)$$

Зробимо декілька зауважень. Якщо енергія електрон-йонної взаємодії $\Phi(r)$ має некулонівський характер, то так званий “псевдопотенціал” може враховувати неточковість йонів

$$\langle \mathbf{k}' | \Phi | \mathbf{k} \rangle = \frac{\sqrt{N_i}}{V} \nu_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}, \quad (39.16)$$

де

$$\nu_{\mathbf{q}} = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} \Phi(R) d\mathbf{R}$$

— коефіцієнт Фур'є енергії електрон-йонної взаємодії, причому коли вона залежить лише від відстані R , то $\nu_{\mathbf{q}} = \nu_q$, $q = |\mathbf{q}|$.

Далі, якщо врахувати екранування, то необхідно зробити заміну: $\nu_q \rightarrow \nu_q/\varepsilon(q)$, де $\varepsilon(q)$ — діелектрична функція системи [20]. Для розрідженої плазми $\varepsilon(q) \simeq 1$.

Величина $|\rho_{\mathbf{q}}|^2 = \rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}$ після усереднення за йонними конфігураціями (а таке усереднення розуміється в коефіцієнті поглинання, оскільки в його означенні є підсумовування за початковими станами, які включають і стани йонів) дає структурний фактор йонів $S_q = \langle |\rho_q|^2 \rangle$ [20]. Для розріджених систем, якою є плазма в атмосфері зір, величина S_q близька до одиниці. За своїм змістом структурний фактор S_q — це середньоквадратична флюктуація йонної густини. Для рідин величина S_q відрізняється від одиниці, особливо при q порядку обернених міжатомних віддалей і менше. Для всіх систем при $q \rightarrow \infty$, $S_q \rightarrow 1$, а при $q \rightarrow 0$ структурний фактор $S_{q=0} = TN_i \kappa_T / V$, де ізотермічна стисливість $\kappa_T = -(\partial V / \partial P)_T / V$, P — тиск.

Таким чином, у нашому випадку величину $|\rho_{\mathbf{q}}|^2$ у виразі для сили осцилятора можна опустити:

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2^5 \pi^2 e^4 Z^2 N_i}{3m\hbar\omega^3} \frac{1}{V^2} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}. \quad (39.17)$$

Цей вираз для сил осцилятора нормований на квазідискретний спектр хвильових векторів. Для нормування на неперервні значення, наприклад, \mathbf{k}' , необхідно перейти від підсумовування за хвильовим вектором до відповідного інтеграла. Отже, необхідно, як це вже ми робили в попередньому параграфі, домножити одержану силу осцилятора на $V/(2\pi)^3$:

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \frac{2^5 \pi^2 e^4 Z^2 N_i}{3m\hbar\omega^3} \frac{1}{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}. \quad (39.18)$$

Підкреслюємо ще раз, що цей вираз для сили осцилятора нормований на неперервні значення хвильового вектора \mathbf{k}' і дискретні для \mathbf{k} .

Як видно з (39.18), сила осцилятора для вільно-вільних переходів є пропорційною до числа йонів в одиниці об'єму (N_i/V). Отже, для розрахунку в наближеннях вищих, ніж борнівське, яке ми одержали, можна “точно” обчислити силу осцилятора в полі одного йона, використавши точні функції неперервного спектра і помноживши результат на число йонів в одиниці об'єму.

Нарешті знайдемо усереднену за кутами силу осцилятора:

$$\begin{aligned} \overline{f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}} &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'} = \frac{2^5 \pi^2 e^4 Z^2 N_i}{3m\hbar\omega^3} \frac{1}{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \\ &\times \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{dx}{k'^2 + k^2 - 2kk'x}, \end{aligned} \quad (39.19)$$

де $x = \cos \widehat{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Інтегрування остаточно дає:

$$\begin{aligned} \overline{f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}} &= \frac{2}{3\pi} \frac{e^4 Z^2 N_i}{m\hbar\omega^3} \frac{1}{V} \frac{1}{kk'} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \\ &= \frac{2^4}{3\pi} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^4 \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \frac{N_i}{V} \frac{1}{kk'} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right|, \end{aligned} \quad (39.20)$$

де для знерозмірення використано величину ω_c з (37.5). Цим виразом можна послуговуватися для числових підрахунків коефіцієнта неперервного поглинання, якщо фізичні умови в зоряній атмосфері відповідають умовам застосування борнівського наближення.

§ 40. Квазікласичне наближення для сил осциляторів атома водню в неперервному спектрі

Використаймо квазікласичний вираз (28.3) для сили осцилятора атома водню в дискретному спектрі і знайдемо сили осцилятора для зв'язано-вільного й вільно-вільного переходів.

Отже, розглянемо спочатку зв'язано-вільні переходи. Покладемо формально у формулі (28.3), як це робилось раніше в § 38, головне квантове число кінцевого стану

$$n' = Z/ika_B, \quad (40.1)$$

де \mathbf{k} — хвильовий вектор електрона в кінцевому стані.

З метою правильного нормування сил осцилятора переходимо в правилі сум (24.4) від підсумовування за n' до інтеграла $\int dn'$:

$$\sum_{n'} f_{n'n} \rightarrow \int dn' f_{n'n}. \quad (40.2)$$

Причому оскільки

$$\frac{dn'}{n'^3} = \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 k^3 d\left(-\frac{1}{k}\right) = \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 k dk,$$

то

$$\int dn' f_{n'n} = \int_0^{\infty} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 kn'^3 f_{n'n} dk = \int_0^{\infty} f_{n \rightarrow k} dk, \quad (40.3)$$

де сила осцилятора

$$f_{n \rightarrow k} = \sum_{l,m} f_{n,l,m \rightarrow k} = \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 n'^3 k f_{n'n}, \quad (40.4)$$

а під квантовим числом n' розуміємо (40.1).

Беручи до уваги вираз (28.3), знаходимо квазікласичний вираз сили осцилятора для переходу з дискретного стану в неперервний

$$f_{n \rightarrow k} = \frac{2^5}{3\pi\sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \frac{k}{n^3}, \quad (40.5)$$

при цьому пам'ятаємо, що тут, згідно з умовами квазікласичності, $k \rightarrow 0$, $n \gg 1$, а частота ω і хвильовий вектор k зв'язані законом збереження енергії:

$$\frac{\omega}{\omega_c} = \frac{1}{n^2} + \left(\frac{ka_B}{Z} \right)^2. \quad (40.6)$$

У зв'язку з цим вираз для сил осцилятора можна записати так:

$$f_{n \rightarrow k} = \begin{cases} \frac{2^5}{3\pi\sqrt{3}} \frac{a_B}{Z} \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \frac{1}{n^3} \sqrt{\frac{\omega}{\omega_c} - \frac{1}{n^2}}, & \omega \geq \frac{\omega_c}{n^2}, \\ 0, & \omega < \frac{\omega_c}{n^2}. \end{cases} \quad (40.7)$$

Тут цікаво зупинитись на правилі сум Томаса–Райхе–Куна. При наближеному розрахунку в § 26 сил осцилятора для дискретного спектра ми використали інформацію про точне значення внеску неперервного спектра в це правило. Підрахуємо тепер з нашим наближенням виразом для сили осцилятора (40.5) внесок неперервного спектра в правило сум:

$$\int_0^\infty dk f_{n \rightarrow k} = \frac{2^5}{3\pi\sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \frac{1}{n^3} \int_0^\infty \frac{k dk}{[1/n^2 + (ka_B/Z)^2]^3} = \frac{2^3 n}{3\pi\sqrt{3}}. \quad (40.8)$$

Звідси для $n = 1$ отримуємо:

$$\int_0^\infty dk f_{n \rightarrow k} = \frac{2^3}{3\pi\sqrt{3}} = 0.4900701. \quad (40.9)$$

Це число, знайдене у квазікласичному наближенні, необхідно порівняти з точним значенням 0.434996, про яке йшлося в § 26. Для поліпшення узгодженості необхідно у квазікласичному виразі для сил осцилятора враховувати фактор Гаунта [15].

У § 28 ми запропонували для сили осцилятора вираз (28.1), у якому чисельне значення множника const визначили з рівняння (28.6) за відомою його лівою частиною. Для дотримання самоузгодженості визначення const ліву частину рівняння (28.6) також потрібно обчислювати за допомогою квазікласичного виразу

(28.1), аналітично продовженого, згідно з (38.2), на неперервні значення квантового числа n' . Отже, у формулі (40.3), замість виразу (28.3) для $f_{n'n}$, потрібно брати вираз (28.1). Іншими словами, у формулі (40.5), замість множника $2^5/3\pi\sqrt{3}$, беремо const, а у виразі (40.8) це дасть, замість $2^3/3\pi\sqrt{3}$, величину const/4. Тепер із правила сум для сил осцилятора будемо мати, що

$$\sum_{n'} f_{n'n} = 1 - \frac{\text{const}}{4}.$$

Нарешті з (28.6), (28.7) для $n = 1$ отримаємо рівняння на визначення невідомої величини const:

$$1 - \frac{\text{const}}{4} = \text{const} \left(\frac{\zeta(3)}{4} + \frac{3}{32} \right)$$

або

$$\text{const} = \left(\frac{1}{4} + \frac{\zeta(3)}{4} + \frac{3}{32} \right)^{-1} = 1.552158.$$

Квазікласичний коефіцієнт $32/3\pi\sqrt{3} = 1.960281$ ліпше узгоджується із цим значенням, ніж зі знайденим 1.433049 у § 28 без процедури самоузгодження: фактор Гаунта $g = \text{const}/(32/3\pi\sqrt{3}) = 0.792$. Однак у майбутньому потрібно також брати до уваги, що фактор Гаунта в ультрафіолетовій та видимій ділянках спектра близький до одиниці.

Якщо кінцевий стан електрона у неперервному спектрі описувати не квантовими числами (k, l, m) , а хвильовим вектором \mathbf{k} , то потрібно вводити силу осцилятора $f_{n \rightarrow \mathbf{k}}$, яка залежить від \mathbf{k} , а не від $k = |\mathbf{k}|$. Робимо це шляхом перенормування сили осцилятора $f_{n \rightarrow k}$ так:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk f_{n \rightarrow k} &= \int_0^\infty 4\pi k^2 \frac{f_{n \rightarrow k}}{4\pi k^2} dk \\ &= \int d\mathbf{k} f_{n \rightarrow \mathbf{k}}, \end{aligned} \tag{40.10}$$

де

$$f_{n \rightarrow \mathbf{k}} = \frac{1}{4\pi k^2} f_{n \rightarrow k}. \quad (40.11)$$

Отже, з урахуванням (40.5) маємо

$$f_{n \rightarrow \mathbf{k}} = \frac{2^3}{3\pi^2 \sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \frac{1}{n^3 k}. \quad (40.12)$$

Розгляньмо вільно-вільні переходи. Початковий стан електрона, що рухається в полі N_i йонів в об'ємі V , задає хвильовий вектор \mathbf{k} , а кінцевий — \mathbf{k}' . У формулі (40.11), яка визначає сили осцилятора для переходу електрона зі зв'язаного стану з квантовим числом n у вільний з хвильовим вектором \mathbf{k}' в полі кулонівського потенціалу одного йона, ще раз робимо формальну заміну

$$n = Z/ika_B$$

і переходимо до неперервних значень n .

Беручи до уваги, що $f_{n \rightarrow \mathbf{k}'} \sim 1/n^3$, питання нормування сил осцилятора вирішуємо подібно до (40.2), (40.3):

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{1}{n^3} n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}'} &\rightarrow \int \frac{dn}{n^3} n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}'} = \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \int_0^\infty k dk n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}} \\ &= \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi k} n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}'} \Big|_{V \rightarrow \infty} = \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{4\pi k} n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \frac{(2\pi)^3}{V} \frac{1}{4\pi k} n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (40.13)$$

де

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \frac{(2\pi)^3}{V} \frac{1}{4\pi k} n^3 f_{n \rightarrow \mathbf{k}'}. \quad (40.14)$$

Ми скористались тут формулою (37.13) для переходу від неперервних значень хвильового вектора \mathbf{k} до дискретних, а також тим, що $f_{n \rightarrow \mathbf{k}'}$ залежить лише від модуля векторів \mathbf{k} і \mathbf{k}' .

Таким чином, для одного йона ($N_i = 1$), з урахуванням явного виразу величини $f_{n \rightarrow k'}$ з (40.12), сила осцилятора

$$f_{k \rightarrow k'} = \frac{2^3}{3\pi^2\sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \frac{1}{k'} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 \frac{(2\pi)^3}{V} \frac{1}{4\pi k}.$$

Остаточо для N_i однакових йонів із зарядом Z маємо

$$f_{k \rightarrow k'} = \frac{2^4}{3\sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^4 \frac{N_i}{V} \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \frac{1}{kk'}, \quad (40.15)$$

де частота

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k'^2 - k^2).$$

Таким чином, вираз (40.15) для $f_{k \rightarrow k'}$ має мішане нормування. Тобто він нормований так, що підсумовування за початковими квантовими числами A означає підсумовування за хвильовим вектором \mathbf{k} , а підсумовування за A' , згідно з нормуванням (40.9), означає інтегрування за \mathbf{k}' :

$$\sum_A = \sum_{\mathbf{k}}, \quad \sum_{A'} = \int d\mathbf{k}'.$$

Відповідно до цього розмірність $f_{k \rightarrow k'}$ дорівнює довжині, піднесений до куба (для 3-вимірного простору).

Детальніше поговоримо про нормування цієї величини. Квантові числа початкового стану електрона описують і спінові ступені вільності, а саме $A = (\mathbf{k}, s)$, де s — спінове число, яке набуває два значення: $1/2$ (в одиницях \hbar) — для стану “спін уверх” та $(-1/2)$ — для стану “спін униз”. Відповідно в кінцевому стані $A' = (\mathbf{k}', s')$. Унаслідок того, що матричний елемент у виразі для $f_{A'A}$, який входить у коефіцієнт поглинання (6.6), обчислюємо від оператора, незалежного від спінових змінних, то $f_{A'A} \rightarrow \delta_{s's}$ і тому сума за s' зникає. Підсумовування за s стосуються лише статистичного оператора, який також не залежить від спінового квантового числа, через те підсумовування за s дає число 2 як множник. Оскільки ρ_A нормована на одиницю, то спінові змінні випадуть з остаточних виразів.

Нарешті зробимо таке зауваження. Легко бачити, що формулу (40.15) для $f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}$ формально можна отримати з усередненого за кутами борнівського наближення (39.20), якщо в ньому $\ln |(k + k')/(k - k')|$ замінити на число $\pi/\sqrt{3}$, тобто слабку логарифмічну залежність замінити сталою величиною.

§ 41. Коефіцієнт неперервного поглинання атома водню. Вільно-вільні переходи

Як ми вже зазначали, поглинання в неперервному спектрі зоряних атмосфер зумовлене головно воднем, оскільки водень переважає всі інші елементи в хімічному складі зорі. Водень може бути в різних станах: H , H^+ , H^- , H_2^+ . Тут ми зосередимо свою увагу на обчисленні внеску в коефіцієнт неперервного поглинання вільно-вільних переходів в атомі водню.

Виходимо із загального виразу (6.6),

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2 N_e}{mc V} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{A, A'} \rho_A f_{AA'} \delta(\omega_{A'A} - \omega), \quad (41.1)$$

причому $A = \mathbf{k}$, $A' = \mathbf{k}'$, число частинок N — це повне число електронів в об'ємі, яке ми позначимо через N_e , $N = N_e$. Далі сила осцилятора

$$f_{AA'} = f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'},$$

а частота переходу

$$\omega_{A'A} = \frac{\hbar k'^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Для сил осциляторів використовуємо квазікласичне наближення (40.15). Пам'ятаємо також, що ця сила осцилятора має мішане нормування, тому підсумовування за A та A' розуміємо, згідно з (40.12), як підсумовування за \mathbf{k} та інтегрування за \mathbf{k}' . Статистична вага початкового стану електрона

$$\rho_A = \frac{1}{Z_e} e^{-\hbar^2 k^2 / 2mT},$$

де сума станів (статистична сума)

$$\begin{aligned} Z_e &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-\hbar^2 k^2 / 2mT} \underset{V \rightarrow \infty}{=} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{-\hbar^2 k^2 / 2mT} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2\pi mT}{\hbar^2} \right)^{3/2}, \end{aligned} \quad (41.2)$$

і отже,

$$\rho_A = \frac{(2\pi)^3}{V} \left(\frac{\hbar^2}{2\pi mT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2mT}\right). \quad (41.3)$$

Позначмо внесок у коефіцієнт поглинання (41.1) від вільно-вільних переходів через $\varkappa_{f-f}(\omega)$ ⁴. Збираючи все разом і беручи до уваги, що коефіцієнт поглинання залежить лише від частоти випромінювання, з (41.1) отримаємо:

$$\begin{aligned} \varkappa_{f-f}(\omega) &= \frac{2\pi^2 e^2 N_e}{mc} \frac{2^4}{V 3\sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^4 \frac{N_i}{V} \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \\ &\times \frac{(2\pi)^3}{V} \left(\frac{\hbar^2}{2\pi mT} \right)^{3/2} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \\ &\times \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k} e^{-\hbar^2 k^2 / 2mT} \int \frac{d\mathbf{k}'}{k'} \delta\left(\frac{\hbar k'^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m} - \omega \right). \end{aligned} \quad (41.4)$$

Інтегруємо за штрихованим хвильовим вектором, використовуючи добре відомі властивості δ -функції:

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{k}'}{k'} \delta\left(\frac{\hbar k'^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m} - \omega \right) &= 4\pi \int_0^\infty k' dk' \delta\left(\frac{\hbar k'^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m} - \omega \right) \\ &= 4\pi \int_0^\infty k' \frac{\delta(k' - k_0)}{|\hbar k'/m|} dk' = \frac{4\pi m}{\hbar}, \end{aligned} \quad (41.5)$$

⁴Індекс “ $f - f$ ” — це перші літери англійських слів “free-free” — вільно-вільний.

де

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}\omega + k^2}.$$

Далі інтегруємо в (41.4) за хвильовим вектором \mathbf{k} :

$$\begin{aligned} & \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k} e^{-\hbar^2 k^2/2mT} \underset{V \rightarrow \infty}{=} \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{k} e^{-\hbar^2 k^2/2mT} = 4\pi \int_0^\infty k e^{-\hbar^2 k^2/2mT} dk = \frac{4\pi m}{\hbar^2} T. \end{aligned} \quad (41.6)$$

і знаходимо

$$\begin{aligned} \kappa_{f-f}(\omega) &= \frac{2\pi^2 e^2 N_e}{mc} \frac{2^4}{V 3\sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^4 \frac{N_i}{V} \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2\pi m T}\right)^{3/2} \\ &\times \frac{4\pi m}{\hbar} \frac{4\pi m}{\hbar^2} T \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right). \end{aligned} \quad (41.7)$$

Остаточно цей вираз переписуємо в такому вигляді:

$$\begin{aligned} \kappa_{f-f}(\omega) &= \frac{2^8 \pi^{5/2} e^2}{3\sqrt{3} \hbar c} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^5 \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \left(\frac{\hbar\omega_c}{T}\right)^{1/2} \\ &\times n_i n_e \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right), \end{aligned} \quad (41.8)$$

для зручності користування ще раз наведемо знайомі позначення

$$\omega_c = \frac{Z^2 e^2}{2a_B \hbar}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

і, крім того, тут вводимо нові позначення

$$n_i = \frac{N_i}{V}, \quad n_e = \frac{N_e}{V} \quad (41.9)$$

для кількості йонів та електронів в одиниці об'єму.

Як бачимо, коефіцієнт поглинання, окрім усього, є пропорційним до константи тонкої структури $e^2/\hbar c \simeq 1/137$. Це ми обговорювали при побудові кінетичного рівняння для фотонів.

Вираз для $\kappa_{f-f}(\omega)$ можна також переписати й у такому вигляді:

$$\kappa_{f-f} = \frac{16\sqrt{2}\pi^{5/2}}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^2}{c\hbar m^{3/2}} \frac{n_i n_e}{\omega^3 T^{1/2}} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right). \quad (41.10)$$

Нарешті зауважимо, що розмірність $\kappa_{f-f}(\omega)$, як і повинно бути, є оберненою до довжини, що добре видно з першого запису (41.8).

§ 42. Коефіцієнт неперервного поглинання атома водню. Зв'язано-вільні переходи

Ми знову виходимо із загального виразу

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \frac{N}{V} \sum_{A,A'} \rho_{Af} \rho_{AA'} \delta(\omega_{A'A} - \omega), \quad (42.1)$$

де N — це число атомів водню в атмосфері зорі, що займає об'єм V , а квантові числа A, A' — це квантові числа, що характеризують рух електрона відносно центра мас: $A = (n, l, m)$, $A' = \mathbf{k}$. Тут, узагалі кажучи, треба було б додати ще спінові квантові числа s, s' — проекції спіну електрона на вісь z . Однак, як ми говорили, у цьому немає потреби, оскільки оператори не залежать від спінових змінних і з остаточних виразів спінові стани випадають. Далі маємо:

$$E_A = -\frac{Z^2 e^2}{2a_B n^2}, \quad E_{A'} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

$$\rho_A = \frac{e^{-E_n/T}}{Z_a}, \quad E_n \equiv E_A, \quad (42.2)$$

$$Z_a = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l e^{-E_n/T} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-E_n/T} n^2$$

— статистична сума атома для внутрішніх ступенів вільності.

Отже, та частина коефіцієнта поглинання, яка зумовлена зв'язано-вільними переходами,⁵

$$\begin{aligned} \kappa_{b-f}(\omega) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mc V} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_s \sum_{n,l,m} \int d\mathbf{k} \\ &\times \frac{e^{-E_n/T}}{Z_a} f_{n,l,m \rightarrow \mathbf{k}} \delta\left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{Z^2 e^2}{2a_B n^2 \hbar} - \omega\right). \end{aligned} \quad (42.3)$$

Силу осцилятора

$$f_{n \rightarrow \mathbf{k}} = \sum_{lm} f_{n,l,m \rightarrow \mathbf{k}}$$

візьмемо в квазікласичному наближенні (40.12), і в результаті коефіцієнт поглинання

$$\begin{aligned} \kappa_{b-f}(\omega) &= \frac{2\pi^2 e^2 N}{mc Z_a V} \frac{2^3}{3\pi^2 \sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \\ &\times 2 \sum_n e^{-E_n/T} \frac{1}{n^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{k} \delta\left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{Z^2 e^2}{2a_B n^2 \hbar} - \omega\right). \end{aligned} \quad (42.4)$$

Далі інтегруємо дельта-функцію:

$$\begin{aligned} &\int \frac{d\mathbf{k}}{k} \delta\left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{Z^2 e^2}{2a_B n^2 \hbar} - \omega\right) \\ &= 4\pi \int_0^\infty k dk \delta\left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{Z^2 e^2}{2a_B n^2 \hbar} - \omega\right) = \frac{4\pi m}{\hbar}. \end{aligned}$$

Це за умови, що $\hbar\omega \geq Z^2 e^2 / 2a_B n^2$, а якщо ця умова не виконується, то інтеграл дорівнює нулеві. Таким чином:

$$\kappa_{b-f}(\omega) = \frac{2\pi^2 e^2 N}{mc Z_a V} \frac{2^3}{3\pi^2 \sqrt{3}} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^2 \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \frac{4\pi m}{\hbar}$$

⁵Індекс “b - f” — це перші літери англійських слів “bound-free” — зв'язано-вільний.

$$\times \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) 2 \sum_{n \geq n_c} \frac{e^{-E_n/T}}{n^3}, \quad (42.5)$$

граничні значення головного квантового числа n_c дорівнюють цілому від величини $(\omega_c/\omega)^{1/2}$. Як звично, операцію взяття цілої частини числа позначмо квадратними дужками:

$$n_c = \left[\left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^{1/2} \right]. \quad (42.6)$$

Остаточно:

$$\begin{aligned} \kappa_{b-f}(\omega) &= \frac{2^7 \pi e^2}{3\sqrt{3} \hbar c} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^2 \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \\ &\times \frac{N}{Z_a V} \sum_{n \geq n_c} \frac{1}{n^3} e^{\frac{\hbar\omega_c}{T}/n^2}. \end{aligned} \quad (42.7)$$

До цієї формули потрібно зробити зауваження. Величина

$$Z_a = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{\frac{\hbar\omega_c}{T}/n^2}$$

з (42.2) є розбіжною. Це пов'язано з тим, що число рівнів в атомі водню є безмежним, $1 \leq n < \infty$. Насправді, внаслідок екранування іншими зарядами атмосфери зорі (йони, електрони), кулонівський потенціал ядра стає короткодіючим (екранованим) і число рівнів — скінченним. Наприклад, якщо радіус екранування Дебая $r_D = \kappa_D^{-1}$, $\kappa_D = (4\pi e^2 \sum_i Z_i^2 N_i / TV)^{1/2}$ (див. формулу (18.20)) є порядку борівського радіуса $\kappa_D a_B \simeq 1$, то всі зв'язані стани зникають.

Справді, з квантової механіки добре відомо, що кількість дискретних рівнів енергії частинки з масою m у полі з потенціальною енергією $U = U(r)$ дорівнює [13]

$$-\frac{m}{4\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) r dr.$$

Для екранованого потенціалу —

$$U = -\frac{e^2}{r} e^{-\varkappa_D r},$$

це число, як легко пересвідчитись, дорівнює $1/4a_B \varkappa_D$. Отже, умовою існування зв'язаних станів є $4a_B \varkappa_D < 1$, а для бодай одного зв'язаного стану потрібно, щоб $4a_B \varkappa_D = 1$. Якщо $a_B \varkappa_D \sim 1$, то ця умова не виконується і зв'язаних станів немає. Суть наших висновків не зміниться, коли вираз для кількості дискретних рівнів енергії взяти ще точнішим.

Якщо опис плазми атмосфери зорі вимагає квантового підходу, то радіусом екранування буде радіус Томаса-Фермі $r_{T-F} = 1/\varkappa_{T-F}$ і для системи з N_e електронів

$$\varkappa_{T-F} = \left(\frac{4k_F}{\pi a_B} \right)^{1/2}, \quad (42.8)$$

де хвильовий вектор Фермі

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N_e}{V} \right)^{1/3}.$$

Величину \varkappa_{T-F} отримуємо формально з виразу \varkappa_D заміною класичного виразу середньої теплової енергії електрона $3T/2$ на енергію Фермі $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. Таким чином, фактично Z_a є величиною скінченною.

Указану трудність із невизначеністю величини Z_a можна обійти за допомогою так званого закону діючих мас. У нашому випадку процес поглинання й випромінювання можна зобразити реакцією (1.2) для зв'язано-вільних переходів, яку тепер запишемо так:



де A — нейтральний атом водню, A^+ — додатний йон, тобто протон. Будемо розглядати цей процес як хімічну реакцію. Закон рівноваги хімічної реакції, яку символічно записують як

$$\sum_j \nu_j A_j = 0, \quad (42.10)$$

де A_j — хімічні символи реагуючих речовин, а ν_j — цілі додатні або від'ємні числа, має такий вигляд:

$$\sum_j \nu_j \mu_j = 0, \quad (42.11)$$

де μ_j — хімічний потенціал відповідної величини. Рівняння рівноваги (42.11) є необхідною умовою мінімуму термодинамічного потенціалу повної системи при заданих тиску й температурі. Іншими словами, це рівняння є умовою рівності нулів похідної від термодинамічного потенціалу за кількістю частинок однієї з речовин, що беруть участь у реакції. Причому похідну беремо за умови (42.10), тобто що відносна зміна кількості частинок i -тої та j -тої речовини дорівнює ν_i/ν_j .

У нашому випадку (42.9) маємо реакцію

$$A - A^+ - e = 0, \quad (42.12)$$

і отже, коефіцієнти для атома йона та електрона є такими: $\nu_A = 1$, $\nu_i = -1$, $\nu_e = -1$. Тепер умова хімічної рівноваги (42.11) набуває вигляду

$$\frac{\partial F}{\partial N} - \frac{\partial F}{\partial N_i} - \frac{\partial F}{\partial N_e} = 0, \quad (42.13)$$

де

$$F = -T \ln Z \quad (42.14)$$

— вільна енергія повної системи, тобто суміші N атомів, N_i йонів та N_e електронів, Z — статистична сума. Уважаємо, що суміш є ідеальним газом. Статистичну суму записуємо як добуток статистичних сум:

$$Z = \frac{Z_A^N Z_i^{N_i} Z_e^{N_e}}{N! N_i! N_e!}, \quad (42.15)$$

де Z_A , Z_i та Z_e — це статистичні суми окремих атома, йона та електрона відповідно. Якщо використати для факторіала великих чисел N, N_i, N_e формулу Стірлінга ($N! \simeq (N/e)^N$, $N \gg 1$,

e — основа натуральних логарифмів), то з (42.13)–(42.15) знаходимо умову рівноваги хімічної реакції:

$$-T \ln \left(\frac{Z_A}{N} \right) + T \ln \left(\frac{Z_i}{N_i} \right) + T \ln \left(\frac{Z_e}{N_e} \right) = 0. \quad (42.16)$$

Це і є закон діючих мас, який можна записати ще й так:

$$\frac{Z_i Z_e}{Z_A} = \frac{N_i N_e}{N}. \quad (42.17)$$

Для атома розділимо рух центра мас та внутрішні рухи. З урахуванням того, що маси атома і йона є практично рівними (маса електрона більш ніж на три порядки є меншою за масу протона)

$$Z_A = Z_i Z_a,$$

де Z_i — статистична сума, пов'язана з рухом атома як цілого, дорівнює статистичній сумі йона (протона). Отже, маємо, що

$$\frac{N}{Z_a} = \frac{N_i N_e}{Z_e}, \quad (42.18)$$

де статистична сума електрона з урахуванням його спіну

$$\begin{aligned} Z_e &= \sum_s \sum_{\mathbf{p}} e^{-\hbar^2 p^2 / 2mT} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} e^{-\hbar^2 p^2 / 2mT} \\ &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2\pi mT}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (42.19)$$

Отже, з (42.18) знаходимо

$$\frac{N}{Z_a} = \frac{N_i N_e}{2V} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mT} \right)^{3/2} \quad (42.20)$$

або

$$\frac{N}{Z_a} = 4 \frac{N_i N_e}{V} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^3 \left(\frac{\hbar \omega_c}{T} \right)^{3/2} \pi^{3/2}. \quad (42.21)$$

Цей вираз природно узгоджується з нашим зауваженням про екранування вільними зарядами кулонівського потенціалу ядра атома як причиною скінченності величини Z_a : чим більше вільних зарядів, тим менша кількість зв'язаних станів електрона в атомі, а отже, тим меншою є статистична сума Z_a .

Для коефіцієнта поглинання тепер остаточно з (42.7) отримуємо:

$$\begin{aligned} \kappa_{b-f}(\omega) &= \frac{2^9 \pi^{5/2} e^2}{3\sqrt{3} \hbar c} \left(\frac{a_B}{Z}\right)^5 \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^3 \left(\frac{\hbar\omega_c}{T}\right)^{3/2} n_i n_e \\ &\times \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{n \geq n_c} \frac{1}{n^3} e^{\hbar\omega_c/T n^2}, \end{aligned} \quad (42.22)$$

де

$$n_i = \frac{N_i}{V}, \quad n_e = \frac{N_e}{V}.$$

— кількість йонів та електронів в одиниці об'єму.

Повернемось до рівняння йонізаційної рівноваги (42.17). Очевидно, що це рівняння описує рівновагу між атомом, йонізованим атомом і електроном у загальному випадку, а не лише, коли йон є протоном. Якщо виділити зі статистичних сум частинок у (42.17) статистичні суми трансляційних рухів, то одержуємо:

$$\begin{aligned} Z_e &= V \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot 2, \\ Z_i &= V \left(\frac{M_i T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} u_i(T), \\ Z_A &= V \left(\frac{M_a T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-E_0/T} u_a(T), \end{aligned} \quad (42.23)$$

де сума станів за внутрішніми ступенями вільності для електрона дорівнює 2 — від двох можливих напрямків спіну (див. (42.19)), а у “внутрішніх” статистичних сумах для йона $u_i(T)$ та атома $u_a(T)$ енергію відраховуємо від енергії основного стану атома E_0 ;

M_a, M_i — маси атома та йона; $M_a = M_i + m$. Якщо підставити ці вирази в рівняння (42.17), то отримаємо:

$$\frac{n_i n_e}{n_a} = \left(\frac{m^* T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2u_i(T)}{u_a(T)} e^{-\chi/T}, \quad (42.24)$$

де густина атомів $n_a = N/V$; приведена маса $m^* = M_i m / M_a$, а енергія йонізації атома $\chi = -E_0$. Це рівняння йонізаційної рівноваги відоме в астрономічній літературі як формула Саха⁶.

§ 43. Повний коефіцієнт неперервного поглинання для атома водню

Повний коефіцієнт неперервного поглинання $\kappa^c(\omega)$ формується вільно-вільними та зв'язано-вільними переходами:

$$\kappa^c(\omega) = \kappa_{f-f}(\omega) + \kappa_{b-f}(\omega).$$

Підставимо в цей вираз формули (41.8) та (42.22) і знайдемо

$$\begin{aligned} \kappa^c(\omega) = & \frac{2^8 \pi^{5/2} e^2}{3\sqrt{3} \hbar c} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^5 \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \\ & \times \left(\frac{\hbar\omega_c}{T} \right)^{1/2} n_i n_e \left(1 + \frac{2\hbar\omega_c}{T} \sum_{n \geq n_c} e^{\hbar\omega_c/T n^2} \frac{1}{n^3} \right). \end{aligned} \quad (43.1)$$

Нагадуємо, що n_c є цілою частиною $(\omega_c/\omega)^{1/2}$, $n_c = 1, 2, \dots$

Для великих значень n суму за n можна апроксимувати інтегралом. Великі n — це $n \geq n_{\max} \sim 4 \div 5$. Отже, приймаємо, що

$$\sum_{n \geq n_c} = \sum_{n=n_c}^{n_{\max}-1} + \int_{n_{\max}}^{\infty} dn.$$

⁶Меґнад Саха (1893–1956) — індійський фізик і астрофізик. Роботи Саха присвячені різним напрямкам фізики — термодинаміці, ядерній фізиці, фізиці космічних променів, теорії випромінювання, фізиці йоносфери. Світову славу принесла йому теорія термічної йонізації атомів у зоряних атмосферах (формула Саха).

Обчислимо інтеграл:

$$\int_{n_{\max}}^{\infty} \frac{1}{n^3} e^{\hbar\omega_c/Tn^2} dn = \frac{1}{2} \int_0^{1/n_{\max}^2} e^{\hbar\omega_c x/T} dx = \frac{T}{2\hbar\omega_c} \left(e^{\hbar\omega_c/Tn_{\max}^2} - 1 \right).$$

Ми зробили заміну змінної інтегрування: $x = 1/n^2$. Очевидно: $n_{\max} \geq n_c + 1$, якщо $n_{\max} = n_c$, то залишається внесок лише від інтеграла.

Таким чином, підставляючи цей вираз у (43.1), остаточно одержуємо:

$$\begin{aligned} \kappa^c(\omega) = & \frac{2^8 \pi^{5/2}}{3\sqrt{3}} \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{a_B}{Z} \right)^5 \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 \left(\frac{\hbar\omega_c}{T} \right)^{1/2} n_i n_e \\ & \times \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \left(e^{\hbar\omega_c/Tn_{\max}^2} + \frac{2\hbar\omega_c}{T} \sum_{n=n_c}^{n_{\max}-1} \frac{1}{n^3} e^{\hbar\omega_c/Tn^2} \right). \end{aligned} \quad (43.2)$$

Цей вираз можна використовувати не лише для водню ($Z = 1$), але й для водневоподібних йонів, його можна також використовувати і для атомів, у тому числі й важких атомів та йонів, уводячи замість Z деякий ефективний заряд та беручи експериментальні значення граничної частоти ω_c . Точних кількісних результатів очікувати при цьому не слід, хоча для атомів лужних металів таке наближення є достатньо добрим.

§ 44. Коефіцієнт неперервного поглинання від'ємного йона водню H^-

Від'ємний йон водню відіграє важливу роль у формуванні неперервного поглинання зоряних атмосфер. Непрозорість таких зір як Сонце зумовлена, в основному, йоном водню H^- . Для зір з температурою вищою, ніж у Сонця, H^- йонізується, а для холодніших зір концентрація H^- мала внаслідок відсутності вільних електронів, джерелом яких є йонізація металів. Основний

внесок у коефіцієнт неперервного поглинання у видимій ділянці спектра дає фотойонізація H^- , тобто зв'язано-вільний перехід. В інфрачервоній ділянці спектра більшу роль відіграють вільно-вільні переходи.

Від'ємний йон водню має один зв'язаний стан з енергією $E_{H^-} = -0.75416$ eV. Енергія зв'язку електрона в H^- є малою порівняно з енергією йонізації атома водню. Це означає, що один з електронів H^- знаходиться на великій віддалі від ядра. Дійсно, для водню

$$E_H = -\frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}.$$

Покладаємо також і для H^- енергію рівною

$$E_{H^-} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2},$$

де a — характерна довжина.

Звідси, порівнюючи ці два вирази, для величини a , яка має зміст радіуса йона H^- , маємо

$$a = a_B \left(\frac{E_H}{E_{H^-}} \right)^{1/2} \sim 4a_B.$$

За атомними масштабами це велика відстань. У зв'язку з цим можна використати одноелектронне наближення й описувати стан цього віддаленого електрона асимптотичною хвильовою функцією [8]:

$$\psi(\mathbf{r}) = C \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} e^{-r/a}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (44.1)$$

$$a = (-2mE_{H^-}/\hbar^2)^{-1/2}.$$

Стала нормування C та величина a залежать від поведінки електрона всередині атома. Зрозуміло, що для їх визначення необхідно точно розв'язувати задачу. Наприклад, для знаходження енергії зв'язку використовуються варіаційні хвильові функ-

ції, починаючи з роботи С. Чандрасекгара⁷. У результаті було знайдено значення $E_{\text{H}^-} = -0.75416 \text{ eV}$, та $a = 4.25a_{\text{B}}$.

Коефіцієнт C можна оцінити декількома способами. Якщо вважати, що $\psi(\mathbf{r})$ з (44.1) нормована звичайним чином на одиницю, то отримуємо $C = 1$. Однак оскільки це асимптотичне значення дає неправильну поведінку на малих відстанях (хвильова функція $\psi(0) = \text{const}$), то очевидно $C > 1$. Можна вибрати $\psi(\mathbf{r})$ також у вигляді

$$\psi(\mathbf{r}) = C \sqrt{\frac{1}{2\pi a_1}} \frac{1}{r} \left(e^{-r/a_1} - e^{-r/a_2} \right), \quad (44.2)$$

яка якісно правильно описує поведінку хвильової функції при $r \rightarrow 0$, тоді

$$C = (1 + a_2/a_1)^{1/2} / (1 - a_2/a_1) > 1,$$

$$a_2 < a_1.$$

Якщо вибрати модель зі скінченим радіусом R_0 , то наближена хвильова функція (44.1), яка відповідає умові нормування точної хвильової функції, має вигляд⁸:

$$\psi(\mathbf{r}) = C \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{e^{-r/a}}{r}, \quad (44.3)$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{1 - R_0/a}}.$$

Радіус R_0 — це величина близько розміру атома.

Оцінку C можна провести, використовуючи правило суми для сил осцилятора. Нарешті, можна “підібрати” C , щоб у ділянці

⁷Chandrasekhar S. *Astrophys. J.*, **100**, 176 (1944). За дослідження фізичних процесів, важливих для пояснення структури й еволюції зір, Субраман'яна Чандрасекгара (1910–1995) разом із Уільямом Альфредом Фаулером нагороджено Нобелівською премією 1983 року.

⁸Див., наприклад, О. Г. Ситенко, В. К. Тартаковський. *Теорія ядра*. Київ: “Либідь”, 2000.— С. 79–81.

“середніх” значень r асимптотична хвильова функція збігалась із варіаційною. Поки що ми не конкретизуємо сталу нормування C .

Розрахуймо тепер силу осцилятора для зв'язано-вільного переходу $|A\rangle \rightarrow |A'\rangle$, де $|A\rangle$ зв'язаний стан електрона в йоні H^- ,

$$|A\rangle = \psi(\mathbf{r}) = C\sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{e^{-r/a}}{r}, \quad (44.4)$$

а стан в неперервному спектрі є плоскою хвилею де Бройля:

$$|A'\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

Отже, за означенням (11.5), для сили осцилятора маємо:

$$\begin{aligned} f_{A \rightarrow A'} &= \frac{2}{3m\hbar\omega} |\langle A' | \hat{\mathbf{p}} | A \rangle|^2 \\ &= \frac{2}{3m\hbar\omega} |\langle A | \hat{\mathbf{p}} | A' \rangle|^2, \end{aligned} \quad (44.5)$$

де матричний елемент

$$\begin{aligned} \langle A | \hat{\mathbf{p}} | A' \rangle &= C\sqrt{\frac{1}{2\pi aV}} \int \frac{e^{-r/a}}{r} \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \\ &= C \left(\frac{1}{2\pi aV} \right)^{1/2} \hbar\mathbf{k} \int \frac{e^{-r/a}}{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \\ &= C \left(\frac{1}{2\pi aV} \right)^{1/2} \hbar\mathbf{k} \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty e^{-r/a} \sin(kr) dr. \end{aligned} \quad (44.6)$$

Елементарне інтегрування дає

$$\langle A | \hat{\mathbf{p}} | A' \rangle = C \left(\frac{1}{2\pi aV} \right)^{1/2} \frac{4\pi}{k^2 + (1/a)^2} \hbar\mathbf{k}. \quad (44.7)$$

Стан $|A'\rangle$ у неперервному спектрі можна взяти з урахуванням розсіяння таким:

$$|A'\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f \frac{e^{ikr}}{r} \right), \quad (44.8)$$

амплітуду f виберемо з умови ортогональності цієї хвильової функції до $\psi(\mathbf{r})$ з (44.4). Отже, вимагаємо, щоб

$$\langle A|A'\rangle = 0$$

або

$$\int \frac{e^{-r/a}}{r} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f \frac{e^{ikr}}{r} \right) d\mathbf{r} = 0.$$

Обчислюємо інтеграли і знаходимо рівняння

$$\frac{4\pi}{k^2 + (1/a)^2} - f \frac{4\pi}{ik - 1/a} = 0,$$

з якого

$$f = -\frac{a}{1 + ika}.$$

Функції (44.8) є також ортогональні між собою для різних значень хвильових векторів і разом з функцією основного стану (44.4) утворюють повну систему.

Матричний елемент від оператора імпульсу між станами (44.4) та (44.8) збігається з матричним елементом (44.7), обчисленим без урахування розсіяної хвилі, оскільки інтеграл від розсіювальної частини $|A'\rangle$, на яку діє векторний оператор $\hat{\mathbf{p}}$, дорівнює нулеві.

Тепер сила осцилятора:

$$f_{A \rightarrow A'} = \frac{2}{3m\hbar\omega} C^2 \frac{1}{2\pi a V} \frac{\hbar^2 k^2 (4\pi)^2}{[k^2 + (1/a)^2]^2}. \quad (44.9)$$

Із закону збереження енергії $E_{A'} - E_A = \hbar\omega$ маємо

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E = \hbar\omega,$$

а тому що $1/a = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, знаходимо такий зв'язок:

$$k^2 + (1/a)^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega. \quad (44.10)$$

Отже, сила осцилятора остаточно дорівнює

$$f_{AA'} = \frac{4\pi C^2}{3aV} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^3 \frac{k^2}{\omega^3}. \quad (44.11)$$

Визначмо тепер сталу нормування, використовуючи правило сум (24.4). Для обчисленої тут сили осцилятора (44.11) це правило дає

$$\frac{4\pi}{3} \frac{C^2}{a} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^3 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{\omega^3} = 1.$$

Переходимо від підсумовування до інтегрування за \mathbf{k} і беремо до уваги вираз для частоти ω з (44.10):

$$\frac{4\pi}{3} \frac{C^2}{a} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^3 \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty \frac{k^4 dk}{(\hbar/2m)^3 [k^2 + (1/a)^2]^3} = 1. \quad (44.12)$$

Інтегруємо за новою змінною $x = ka$:

$$\frac{16C^2}{3\pi} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{(x^2 + 1)^3} = 1. \quad (44.13)$$

Заміною $x^2 = t$ зводимо цей інтеграл до B -інтеграла Ейлера [28]:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{(x^2 + 1)^3} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty t^{3/2} (1+t)^{-3} dt \\ &= \frac{\Gamma(5/2)\Gamma(1/2)}{2\Gamma(3)} = \frac{3}{16} \Gamma^2(1/2) = \frac{3\pi}{16}. \end{aligned} \quad (44.14)$$

Тепер з (44.13) маємо

$$C = 1. \quad (44.15)$$

Обчислюємо коефіцієнт поглинання

$$\kappa(q) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \frac{N_{\text{H}^-}}{V} \sum_{A,A'} \rho_A f_{AA'} \delta(\omega_{A'A} - \omega), \quad (44.16)$$

де N_{H^-} — кількість від'ємних йонів водню в атмосфері; початкових станів маємо лише один (основний стан йона водню). Отже, коефіцієнт неперервного поглинання від'ємного йона водню, зумовлений зв'язано-вільними переходами, дорівнює:

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \frac{N_{\text{H}^-}}{V} \rho_A \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^3 \\ &\times \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{k^2}{\omega^3} \delta\left(\frac{\hbar}{2m}k^2 + \frac{\hbar}{2ma^2} - \omega\right). \end{aligned} \quad (44.17)$$

Тут ми перейшли від підсумовування за \mathbf{k} до інтегрування. Далі маємо

$$\begin{aligned} &\int d\mathbf{k} \frac{k^2}{\omega^3} \delta\left(\frac{\hbar}{2m}k^2 + \frac{\hbar}{2ma^2} - \omega\right) \\ &= \frac{4\pi}{\omega^3} \int_0^\infty k^4 \delta\left(\frac{\hbar}{2m}k^2 + \frac{\hbar}{2ma^2} - \omega\right) dk, \end{aligned} \quad (44.18)$$

де k_0 визначається з рівняння

$$\frac{\hbar}{2m} \left(k_0^2 + (1/a)^2\right) = \omega,$$

тобто

$$k_0 = \left(\frac{2m}{\hbar}\omega - (1/a)^2\right)^{1/2},$$

причому очевидно $\omega > \hbar/2ma^2$. Тепер

$$\kappa(q) = \frac{4\pi}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \rho_A \left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \frac{N_{\text{H}^-}}{Va} \left(\frac{k_0}{\omega}\right)^3 \left(\frac{\hbar}{m}\right)^3. \quad (44.19)$$

Уведемо граничну частоту фотоефекту для H^- , $\hbar\omega_c = 0.75 \text{ eV}$

$$\omega_c = \frac{\hbar}{2ma^2}, \quad (44.20)$$

Так що

$$k_0 = \left(\frac{2m\omega_c}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{\omega_c} - 1 \right)^{1/2}.$$

Остаточно коефіцієнт поглинання внаслідок фоторозпаду від'ємного йона водню дорівнює

$$\begin{aligned} \kappa(q) &= \frac{16\pi e^2 \hbar}{3 \hbar c m \omega_c} \left(1 - e^{-\hbar\omega/T} \right) \\ &\times \rho_A \frac{N_{\text{H}^-}}{V} \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^3 (\omega/\omega_c - 1)^{3/2}, \quad \omega \geq \omega_c. \quad (44.21) \end{aligned}$$

Зрозуміло, що для $\omega < \omega_c$ коефіцієнт поглинання $\kappa(q) = 0$.

Послідовніший підхід до розрахунку коефіцієнта поглинання для H^- можна провести з двоелектронною варіаційною хвильовою функцією основного стану, яка є симетризованим добутком водневоподібних одноелектронних хвильових функцій. Варіаційними параметрами є ефективні заряди ядра, різні для кожного з електронів: $Z_1 = 1.039230$, $Z_2 = 0.283221$, а енергія йонізації ~ 0.36 eV [8]. Тобто один із зарядів фактично не відрізняється від заряду ядра $Z = 1$, а другий є значно меншим від одиниці. Він і визначає розміри йона $a = a_{\text{B}}/Z_2 \simeq 3.531$, про це йшлося на початку цього параграфу. Саме ця обставина дозволила нам вибрати за хвильову функцію основного стану H^- вираз (44.1). У зв'язку з цим ми не виписуємо тут формулу для $\kappa(q)$, яку отримуємо з двоелектронною варіаційною хвильовою функцією йона H^- .

§ 45. Неперервне поглинання іншими атомами

Крім атома водню в різних квантових станах та від'ємного йона водню H^- , свій внесок у коефіцієнт поглинання в неперервному спектрі дають і молекулярні йони водню. Передусім це йони H_2^+ та H_2^- . Ми не будемо тут розраховувати коефіцієнти поглинання цих йонів, а вкажемо лише на те, що їхній внесок у повний коефіцієнт неперервного поглинання може складати до

10% для зоряних атмосфер, у яких фізичні умови дозволяють існувати таким молекулярним утворенням.

Концентрація $N_{\text{H}_2^+}/V$ молекулярного йона водню H_2^+ відповідно до хімічної реакції його утворення, $\text{H}_2^+ \rightleftharpoons \text{H} + p$ з енергією дисоціації в 2.65 eV, пропорційна добутковій концентрації атомарного водню та протонів. Отже, максимум густини $N_{\text{H}_2^+}/V$ реалізується, коли кількості атомів нейтрального та йонізованого водню рівні.

Зв'язаний молекулярний комплекс H_2^- може існувати лише при низьких температурах, тому його внесок потрібно враховувати для холодних атмосфер.

Помітний внесок у непрозорість зоряної атмосфери дають атоми гелію, концентрація якого щодо водню, як уже зазначалось, є достатньо значною. Причому потрібно брати до уваги як нейтральний гелій, так і однократно йонізований He^+ , тобто водневоподібний йон із зарядом ядра $Z = 2$. Для He^+ обчислення коефіцієнта поглинання можна провести до кінця, оскільки хвильові функції є водневоподібними. Фактично цей коефіцієнт поглинання неважко виписати з формули для коефіцієнта поглинання для атомарного водню з попередніх параграфів, покладаючи заряд ядра $Z = 2$. Розрахунок коефіцієнта поглинання для нейтрального атома гелію проводять з варіаційними хвильовими функціями.

Щодо збуджених та йонізованих станів атома гелію, то вони розпадаються на два класи: синглетні та триплетні стани [8]. Цікаво також зауважити, що можливим є утворення молекулярного комплексу He_2^+ з енергією дисоціації ~ 2.5 eV, який також даватиме внесок у непрозорість атмосфери. Діючи між двома атомами гелію в основному стані слабкі ван-дер-ваальсівські сили не можуть зв'язати їх у молекулу, а комплекс He_2^+ існує у зв'язаному стані.

Внесок у коефіцієнт неперервного поглинання атомів інших елементів є незначним тому, що їхня кількість на декілька порядків менша, ніж водню. Проте прецизійний аналіз фізичних умов в атмосфері зорі вимагає врахування ефектів за їх участю.

Зокрема підкреслимо, що йони H^- утворюються завдяки вивільненню електронів при йонізації атомів металів. А процес фотойонізації йона H^- дає, як ми знаємо, головний внесок у коефіцієнт неперервного поглинання атмосфери Сонця. Отже, атоми металів у зоряній атмосфері виступають як своєрідні ферменти, що запускають механізм утворення й розпаду від'ємних йонів водню, які роблять цю атмосферу непрозорою. Крім того, фотойонізація атомів металів дає і прямий значний внесок у коефіцієнт неперервного поглинання, особливо в ультрафіолетовій ділянці зоряних спектрів.

РОЗДІЛ VII

ФУНКЦІЯ ПЕРЕРОЗПОДІЛУ ЗА ЧАСТОТАМИ ТА КОЕФІЦІЄНТ РОЗСІЯННЯ

§ 46. Функція перерозподілу за частотами

Для фактичного розв'язку рівняння переносу випромінювання нам ще залишилось детально дослідити величини, що зумовлені двофотонними переходами, тобто процесами розсіювання. Зараз ми зосередимо увагу на функції перерозподілу за частотами $R(q, q')$ з (8.4), що відповідає за ці процеси, і у зв'язку з цим уточнимо деякі поняття. Частота ω' електромагнітного випромінювання після його розсіювання системою частинок, узагалі кажучи, відрізняється від частоти падаючої хвилі ω . Це зумовлено рухами частинок, причому потрібно враховувати і рух системи як цілого, і внутрішні рухи. Частота ω' відрізняється від частоти ω на величину власних частот розсіючої системи та на ту енергію, яку фотон передає атомові як цілому, не змінюючи його внутрішнього стану. Таке розсіювання називають некогерентним, або комбінаційним. Якщо розсіювання відбувається без зміни частоти або різниці частот ($\omega' - \omega$) є незначною і нею можна знехтувати, то таке розсіювання називають когерентним.

Вихідні вирази для обчислення функції перерозподілу за частотами задані формулами (12.7) та (12.8) з урахуванням (7.12). Ці формули беруть до уваги також і ефекти розширення спектральних ліній. Хоча вони записані для врахування лише природної ширини спектральних ліній, однак, згідно з міркуваннями, наведеними в § 21, ці вирази залишаються в силі і при врахуванні ефектів міжчастинкових взаємодій, які приводять до квазістаціонарності атомних станів. Просто для цього в рівняннях (12.7),

(12.8) під $\Delta\omega_{AC}$ та γ_{AC} потрібно розуміти повний зсув частот та повну сталу загасання, які зумовлені як радіаційними ефектами, так і міжчастинковою взаємодією. Тут зразу треба зробити застереження, що вплив цих ефектів на контури зоряних спектральних ліній через функцію $R(q, q')$ є незначним унаслідок того, що саме розсіяння є ефектом наступного порядку мализни за сталою тонкої структури $e^2/\hbar c$ порівняно з процесами поглинання. Тому здебільшого при розрахунку функції $R(q, q')$ не братимемо до уваги загасання атомних станів (за винятком так званого резонансного розсіяння), а будемо користуватись вихідним виразом (8.4), в якому функція $\Phi_{A'A}(q, q')$ подана формулою (7.12). Однак це наближення використаємо вже в остаточних виразах.

Переходимо до обговорення функції $\Phi_{A'A}(q, q')$. Під знаком модуля в (7.12) маємо два доданки. Перший з них можна умовно назвати відповідальним за пряме, або істинне, розсіяння. Другий доданок описує віртуальний процес поглинання фотона з переходом атомної системи в проміжний стан $|C\rangle$ і пізнішим випромінюванням фотона. Зрозуміло, що обидва типи розсіяння інтерферують між собою, оскільки береться квадрат модуля суми їхніх внесків і наше розділення є чисто умовним без будь-якої можливості його експериментального виявлення.

Почнемо тепер розрахунок матричних елементів, які входять у вираз (7.12). Якщо формулами (13.1)–(13.3) виділити систему центра мас атома, що розсіює фотони, як це зроблено в § 13 при вивченні ефекту Допплера, то матричний елемент зводиться до добутку символів Кронекера:

$$\begin{aligned} & \langle A' | e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} | A \rangle \\ &= \langle a' | a \rangle \int d\mathbf{R} \frac{e^{-i\mathbf{P}'\mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} \frac{e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}} \quad (46.1) \\ &= \delta_{a'a} \delta(\mathbf{P}/\hbar + \mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{P}'/\hbar). \end{aligned}$$

Пригадаймо, що тут \mathbf{P} , \mathbf{P}' — імпульси атома як цілого до і після розсіяння фотона, \mathbf{R} — координата його центра мас; $|a\rangle$, $|a'\rangle$ —

хвильові функції оптичного електрона, які описують його рух відносно центра мас.

Розрахуємо матричний елемент, що входить у другий доданок під знаком модуля у виразі (7.12) для функції $\Phi_{A'A}(q, q')$:

$$\begin{aligned} \langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | C \rangle &= \langle a | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | c \rangle \\ &\times \int d\mathbf{R} \frac{e^{-i\mathbf{P}\mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \frac{e^{i\mathbf{P}''\mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}} \\ &= \langle a | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | c \rangle \delta(\mathbf{P}''/\hbar - \mathbf{k} - \mathbf{P}/\hbar), \end{aligned} \quad (46.2)$$

тут \mathbf{r}' — координата електрона відносно центра мас, \mathbf{P}'' — імпульс атома у проміжному стані $|C\rangle = |\mathbf{P}'', c\rangle^1$. У дипольному наближенні, коли $\mathbf{k}\mathbf{r}' \ll 1$, маємо

$$\langle A | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | C \rangle = (\mathbf{e}_q \mathbf{p}_{ac}) \delta(\mathbf{P}''/\hbar - \mathbf{k} - \mathbf{P}/\hbar), \quad (46.3)$$

а матричний елемент оператора імпульсу електрона

$$\mathbf{p}_{ac} = \langle a | \hat{\mathbf{p}} | c \rangle = m \langle a | \hat{\mathbf{r}} | c \rangle = im\omega_{ac} \mathbf{r}_{ac}, \quad (46.4)$$

\mathbf{r}_{ac} — матричний елемент координати електрона відносно центра мас. Якщо в Читача виникають деякі сумніви при отриманні цього виразу, рекомендуємо звернутись до міркувань, наведених у § 13 при виведенні формули (13.7).

Тепер із (7.12) знаходимо

$$\begin{aligned} \Phi_{AA}(q, q') &= \left| (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \delta_{a'a} \delta\left(\frac{\mathbf{P}}{\hbar} + \mathbf{k} - \mathbf{k}' - \frac{\mathbf{P}'}{\hbar}\right) + \frac{1}{m\hbar} \right. \\ &\times \sum_{\mathbf{P}''} \sum_c \left[\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{p}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{p}_{ca})}{\omega_{AC} - \omega_{k'}} \delta\left(\frac{\mathbf{P}''}{\hbar} + \mathbf{k} - \frac{\mathbf{P}'}{\hbar}\right) \delta\left(\frac{\mathbf{P}}{\hbar} - \mathbf{k}' - \frac{\mathbf{P}''}{\hbar}\right) \right] \end{aligned}$$

¹Сподіваємось, що Читач не плутатиме позначення квантових чисел проміжних станів атома зі швидкістю світла.

$$+ \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{P}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{P}_{ca})}{\omega_{AC} + \omega_k} \delta \left(\frac{\mathbf{P}''}{\hbar} - \mathbf{k}' - \frac{\mathbf{P}'}{\hbar} \right) \delta \left(\frac{\mathbf{P}}{\hbar} + \mathbf{k} - \frac{\mathbf{P}''}{\hbar} \right) \Bigg|^2, \quad (46.5)$$

де, подібно до (13.6), частота

$$\omega_{AC} = \frac{E_A - E_C}{\hbar} = \omega_{ac} + \frac{\mathbf{P}^2 - \mathbf{P}''^2}{2M\hbar}, \quad (46.6)$$

M — маса атома.

Зважаючи на символи Кронекера в (46.5), частота (46.6) у знаменнику першого доданка під знаком суми за індексом c дорівнює

$$\omega_{AC} = \omega_{ac} + \frac{\mathbf{P}\mathbf{k}'}{M} - \frac{\hbar k'^2}{2M}, \quad (46.7)$$

а в другому —

$$\omega_{AC} = \omega_{ac} - \frac{\mathbf{P}\mathbf{k}}{M} - \frac{\hbar k^2}{2M}. \quad (46.8)$$

Оскільки хвильові вектори $k = \omega_k/c$, $k' = \omega_{k'}/c$, причому $\hbar\omega/Mc^2 \ll 1$, $\hbar\omega'/Mc^2 \ll 1$, то в цих виразах для частот ω_{AC} останніми доданками можна знехтувати. Нагадуємо, що фізичні умови в зоряних атмосферах дозволяють проводити обчислення в рамках нерелятивістської квантової теорії розсіяння.

Знімаємо в (46.5) підсумовування за \mathbf{P}'' і, беручи до уваги (46.4) та той факт, що символ Кронекера, піднесений до квадрата, знову дорівнює символіві Кронекера, знаходимо:

$$\Phi_{A'A}(q, q') = \delta(\mathbf{P}/\hbar + \mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{P}'/\hbar) \Big| (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \delta_{a'a} \quad (46.9)$$

$$+ \frac{m}{\hbar} \sum_c \omega_{a'c} \omega_{ac} \left(\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega_{k'}} + \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega_k} \right) \Big|^2.$$

Символ Кронекера перед знаком модуля забезпечує виконання закону збереження імпульсу в процесах розсіяння для системи “атом плюс фотон”.

Використаймо тепер цей вираз для обчислення функції перерозподілу за частотами з рівняння (8.4). Отже, надалі беремо до уваги односортну систему з N атомами, покладаємо в (8.4) індекси станів рівними $A = (a, \mathbf{P})$, $A' = (a', \mathbf{P}')$, відповідно суми

$$\sum_A = \sum_a \sum_{\mathbf{P}} , \quad \sum_{A'} = \sum_{a'} \sum_{\mathbf{P}'} ,$$

частоту

$$\omega_{A'A} = \omega_{a'a} + \frac{\mathbf{P}'^2 - \mathbf{P}^2}{2M\hbar} , \quad (46.10)$$

статистичну вагу ρ_A беремо у вигляді (13.10), що враховує як внутрішні стани атома, так і його рух як цілого, і після зняття суми за \mathbf{P}' (завдяки символів Кронекера в (46.9)) та переходу від підсумовування за імпульсом \mathbf{P} до інтеграла остаточно отримуємо:

$$\begin{aligned} R(q, q') &= \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \frac{\omega'}{\omega} \sum_a \sum_{a'} \rho_a \int d\mathbf{P} \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}} \\ &\times \delta \left(\omega_{a'a} + \frac{\mathbf{P}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{M} + \omega' - \omega \right) \left| (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \delta_{a'a} \right. \\ &\left. + \frac{m}{\hbar} \sum_c \omega_{a'c} \omega_{ac} \left(\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} + \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} \right) \right|^2 , \end{aligned} \quad (46.11)$$

тут, як і раніше, $\omega = \omega_k$, $\omega' = \omega_{k'}$. Ми дотримуємось тут гіпотези локальної термодинамічної рівноваги і беремо розподіл атомів за імпульсами максвеллівським, а врахування їх мікротурбулентних рухів робимо заміною температури T на ефективну температуру T^* з (14.6).

Дельта-функція в цьому виразі показує, що причиною некогерентного, або комбінаційного, розсіяння є, як уже зазначалось, переходи атома між станами $|a\rangle$ та $|a'\rangle$, що описують внутрішні електронні рухи, а також зміна енергії поступального руху атома під час зіткнення з фотоном (енергія віддачі)². Якщо в (46.11) взяти до уваги в подвійній сумі за a' та a лише один доданок $a = a'$, то некогерентність у ньому будуть визначати лише процеси віддачі, оскільки $\omega_{aa} = 0$. Отже, навіть якщо розсіяння в системі центр мас атома є строго когерентним, то в лабораторній системі, зв'язаній зі спостерігачем, унаслідок ефекту Допплера, перерозподіл за частотами є суттєвим і його потрібно враховувати. Хоча розсіяння може бути близьким до когерентного за умови, що величина повного імпульсу атома $P \ll Mc$.

Вираз (46.11) нескладними перетвореннями можна звести до симетричнішого і простішого вигляду. Насамперед, звернімо увагу на те, що, внаслідок переставних співвідношень між операторами координати та імпульсу, вираз

$$\begin{aligned} & (\mathbf{e}_{q'}\mathbf{r})(\mathbf{e}_q\hat{\mathbf{p}}) - (\mathbf{e}_q\hat{\mathbf{p}})(\mathbf{e}_{q'}\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} e_{q'}^{\mu} e_q^{\nu} (x^{\mu} \hat{p}^{\nu} - \hat{p}^{\nu} x^{\mu}) \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} e_{q'}^{\mu} e_q^{\nu} i\hbar \delta_{\mu\nu} = i\hbar (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}), \end{aligned} \quad (46.12)$$

індекси μ, ν нумерують декартові компоненти векторів. Тому перший доданок під знаком модуля в (46.11) можна записати так:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \delta_{a'a} = \langle a' | \mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'} | a \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle a' | (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r})(\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) - (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}) | a \rangle \end{aligned}$$

²Явище комбінаційного розсіяння світла, коли, крім незміщеної лінії, виникають нові, частоти яких є комбінацією частот падаючого світла і власних частот коливань атома чи молекули (звідси й назва явища), експериментально відкрив у 1928 році індійський фізик Чандрасекара Венката Раман (1888–1970) (Нобелівська премія 1930 року). Тому часто явище комбінаційного розсіяння називають ефектом Рамана або раманівським розсіянням.

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} \sum_c \left(\langle a' | (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}) | c \rangle \langle c | (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | a \rangle \right. \\
&\quad \left. - \langle a' | (\mathbf{e}_q \hat{\mathbf{p}}) | c \rangle \langle c | (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}) | a \rangle \right) \tag{46.13} \\
&= \frac{1}{i\hbar} \sum_c \left((\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{p}_{ca}) - (\mathbf{e}_q \mathbf{p}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca}) \right) \\
&= -\frac{m}{\hbar} \sum_c \left(\omega_{ac} (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca}) + \omega_{a'c} (\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca}) \right).
\end{aligned}$$

Об'єднаймо тепер цей вираз із другим доданком під знаком модуля у формулі (46.11) і в результаті знайдемо, що весь вираз під знаком модуля дорівнює:

$$\begin{aligned}
&(\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) \delta_{a'a} + \frac{m}{\hbar} \sum_c \omega_{a'c} \omega_{ac} \\
&\times \left(\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} + \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} \right) \\
&= \frac{m}{\hbar} \sum_c \left\{ \omega_{a'c} (\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca}) \left[\frac{\omega_{ac}}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} - 1 \right] \right. \\
&\quad \left. + \omega_{ac} (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca}) \left[\frac{\omega_{a'c}}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} - 1 \right] \right\} \\
&= \frac{m}{\hbar} \sum_c \left\{ \frac{(\omega' - \mathbf{P}\mathbf{k}'/M) \omega_{a'c}}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} (\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{(\mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega') \omega_{ac}}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca}) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{m}{\hbar}(\omega - \mathbf{P}\mathbf{k}/M)(\omega' - \mathbf{P}\mathbf{k}'/M) \\
&\times \sum_c \left\{ \frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} + \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} \right\}. \quad (46.14)
\end{aligned}$$

Прокоментуємо ці перетворення. При отриманні другої рівності, обчислюючи вираз у другій квадратній дужці, ми скористались тим, що $\omega_{a'c} - \omega_{ac} = \omega_{a'a}$, а з закону збереження енергій, який забезпечує дельта-функція в (46.11), випливає, що

$$\omega_{a'a} = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}{M} + \omega - \omega',$$

і тому

$$\begin{aligned}
\frac{\omega_{a'c}}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} - 1 &= \frac{\omega_{a'a} + \mathbf{P}\mathbf{k}/M - \omega}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} \\
&= \frac{\mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega}.
\end{aligned}$$

При отриманні наступної рівності в першому доданку у фігурних дужках зроблено такі перетворення:

$$\begin{aligned}
\frac{\omega_{a'c}}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} &= \frac{\omega_{a'a} + \omega_{ac}}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} \quad (46.15) \\
&= \frac{\omega - \omega' + \mathbf{P}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})/M + \omega_{ac}}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'} = 1 + \frac{\omega - \mathbf{P}\mathbf{k}/M}{\omega_{ac} + \mathbf{P}\mathbf{k}'/M - \omega'},
\end{aligned}$$

а в другому —

$$\frac{\omega_{ac}}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega} = 1 + \frac{\mathbf{P}\mathbf{k}/M - \omega}{\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega}. \quad (46.16)$$

Крім того, зауважуємо, що внесок від одиниць з (46.15), (46.16) у вираз (46.14) дорівнює нулеві, оскільки

$$\begin{aligned}
&\sum_c \left((\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca}) - (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca}) \right) \\
&= \langle a' | (\mathbf{e}_q \mathbf{r})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}) - (\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}) | a \rangle = 0.
\end{aligned}$$

Доданки \mathbf{Pk}/M і \mathbf{Pk}'/M у круглих дужках перед сумою за c в (46.14) можна опустити, оскільки вони дадуть в $R(q, q')$ незначний адитивний внесок, а в знаменниках під знаком суми за c їх потрібно зберігати, якщо ми маємо намір урахувувати ефекти розширення профілю функції перерозподілу за частотами, беручи до уваги ефекти загасання атомних станів.

Зважаючи на сказане і підставляючи вираз (46.14) у (46.11), знаходимо:

$$\begin{aligned}
 R(q, q') &= \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega \omega'^3 \sum_a \sum_{a'} \rho_a \int d\mathbf{P} \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}} \\
 &\times \delta \left(\omega_{a'a} + \frac{P(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{M} + \omega' - \omega \right) \quad (46.17) \\
 &\times \left| \frac{m}{\hbar} \sum_c \left(\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \mathbf{Pk}'/M - \omega'} + \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} - \mathbf{Pk}/M + \omega} \right) \right|^2.
 \end{aligned}$$

Вираз (46.17) для функції перерозподілу за частотами $R(q, q')$ є остаточним, і нам хіба що залишилось урахувати в ньому ефекти загасання атомних станів, згідно з рівняннями (12.7), (12.8): тобто замінити в (46.17) дельта-функцію контуром Лоренца, а частоти ω_{ac} на $\omega_{ac} + \Delta\omega_{ac} - i\gamma_{ac}/2$, де стала загасання та зсув частоти формуються як радіаційними ефектами, так і міжатомними взаємодіями. У результаті:

$$\begin{aligned}
 R(q, q') &= \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega \omega'^3 \sum_a \sum_{a'} \rho_a \int d\mathbf{P} \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}} \\
 &\times \frac{\gamma_{a'a}/2\pi}{\left[\omega - \omega' - \omega_{a'a} - \Delta\omega_{a'a} - \mathbf{P}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')/M \right]^2 + \left[\gamma_{a'a}/2 \right]^2} \\
 &\times \left| \frac{m}{\hbar} \sum_c \left(\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \Delta\omega_{ac} + \mathbf{Pk}'/M - \omega' - i\gamma_{ac}/2} \right) \right|^2
 \end{aligned}$$

$$+ \frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \Delta\omega_{ac} - \mathbf{P}\mathbf{k}/M + \omega - i\gamma_{ac}/2} \Bigg|^2. \quad (46.18)$$

У наступному параграфі наведемо декілька наближених виразів для функції перерозподілу за частотами, отриманих із цієї загальної формули.

§ 47. Наближені вирази для функцій перерозподілу за частотами

З метою отримати для функції перерозподілу за частотами формули, придатні для їх практичного використання при дослідженні профілів спектральних ліній шляхом розв'язування рівняння переносу випромінювання, зробимо ще деякі кроки для спрощення виразу (46.18).

Передусім, якщо ми не будемо враховувати ефектів загасання атомних станів у функції $\Phi_{A'A}(q, q')$, про що йшла мова вище, то в знаменниках величини, що стоїть під знаком модуля в (46.18), можна опустити також доданки $\mathbf{P}\mathbf{k}/M$ та $\mathbf{P}\mathbf{k}'/M$. При цьому виникає можливість виконати інтегрування за компонентами імпульсу \mathbf{P} . Справді, спрямовуємо вісь z уздовж вектора $(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$: інтегрування за P_x, P_y дає множник $2\pi MT$, а інтегрування за P_z — це згортка лоренцівського й гауссівського контурів, з якою ми вже мали справу у формулі (13.7) при вивченні ефекту Доплера. І тому зразу пишемо результат:

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega \omega'^3 \sum_a \sum_{a'} \rho_a \frac{H(\alpha, \nu)}{\sqrt{2\pi T/M} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \\ \times \left| \frac{m}{\hbar} \sum_c \left(\frac{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} - \omega'} + \frac{(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})}{\omega_{ac} + \omega} \right) \right|^2, \quad (47.1)$$

де функція Фойгта $H(\alpha, \nu)$ визначена рівнянням (13.19), у якому

$$\alpha = \frac{\gamma_{a'a}}{2|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2T/M}}, \quad (47.2)$$

$$v = \frac{\omega - \omega' - \omega_{a'a} - \Delta\omega_{a'a}}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2T/M}}, \quad (47.3)$$

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = \sqrt{k^2 - 2\mathbf{k}\mathbf{k}' + k'^2} = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{2\omega'}{\omega} \cos \vartheta + \left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2}, \quad (47.4)$$

$\vartheta = \widehat{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ — кут розсіяння.

Отримана формула для $R(q, q')$ все ще незручна для практичного використання, оскільки її залежність від кутів є надто непростою. Мова йде про залежність від кута між одиничними векторами поляризації \mathbf{e}_q та $\mathbf{e}_{q'}$, яка заплутана через кути між цими векторами та матричними елементами радіус-вектора оптичного електрона. Пам'ятаючи, що свій внесок у рівняння переносу випромінювання функція $R(q, q')$ дає через інтегрування за кутами, ми можемо дещо “згладити” тонку мереживну структуру її кутової залежності, не втрачаючи на точності остаточних результатів для профілів спектральних ліній атомів. Зважаючи на це, проведімо усереднення скалярних добутків $(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{ca})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})$, які входять у (47.1), за напрямками векторів $\mathbf{r}_{a'c}$ і \mathbf{r}_{ca} . Позначмо це усереднення рисою:

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca}) &\rightarrow \overline{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})} \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} e_q^{\mu} e_{q'}^{\nu} \overline{x_{a'c}^{\mu} x_{ca}^{\nu}} \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} e_q^{\mu} e_{q'}^{\nu} \delta_{\mu\nu} \overline{|x_{ac}^{\nu}|^2} \delta_{a'a} \\ &= \delta_{a'a} \frac{1}{3} \sum_{\nu} e_q^{\nu} e_{q'}^{\nu} |\mathbf{r}_{ac}|^2 = \delta_{a'a} \frac{1}{3} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) |\mathbf{r}_{ac}|^2. \end{aligned} \quad (47.5)$$

Тут тимчасово індексами μ, ν позначено компоненти векторів уздовж відповідних осей декартових координат (x, y, z) . Ми використали ще й те, що усереднення “перехресних” доданків типу $\overline{x_{a'c} y_{ca}}$ та $\overline{x_{a'c} x_{ca}}$, $a \neq a'$ дорівнює нулеві внаслідок непарності

цих виразів, а також те що, наприклад, середнє $\overline{x_{ac}x_{ca}} = \overline{|x_{ac}|^2} = |\mathbf{r}_{ac}|^2/3$. Із цим ми вже мали справу при введенні сили осцилятора формулами (11.5) та (11.7). У результаті такої процедури середнє

$$\overline{(\mathbf{e}_q \mathbf{r}_{a'c})(\mathbf{e}_{q'} \mathbf{r}_{ca})} = \delta_{a'a} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'}) |\mathbf{r}_{ac}|^2/3, \quad (47.6)$$

і якщо скористатись ще означенням (11.7) для сили осцилятора

$$f_{ca} = \frac{2m\omega_{ca}}{3\hbar} |\mathbf{r}_{ca}|^2,$$

то з (47.1) матимемо

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega \omega'^3 (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \sum_a \rho_a \frac{H(\alpha, v)}{\sqrt{2\pi T/M} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \times \left| \frac{1}{2} \sum_c \frac{f_{ca}}{\omega_{ac}} \left(\frac{1}{\omega_{ac} - \omega'} + \frac{1}{\omega_{ac} + \omega} \right) \right|^2, \quad (47.7)$$

причому тут аргументи функції Фойґта є значно простішими:

$$\alpha = \frac{\gamma_{aa}}{2|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2T/M}}, \quad (47.8)$$

$$v = \frac{\omega - \omega'}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2T/M}}. \quad (47.9)$$

Отже, кутова залежність функції перерозподілу за частотами природно звелась до залежності від кута розсіяння та від кута між напрямками поляризацій падаючого і розсіяного випромінювання.

Вираз (47.7) вже придатний для проведення практичних розрахунків. Потрібно також пам'ятати, що при врахуванні мікротурбулентних рухів речовини атмосфери зорі під температурою T у наведених виразах слід розуміти ефективну температуру T^* , означену рівнянням (14.6).

Якщо не брати до уваги загасання атомних станів $|a\rangle$, тобто покласти $\gamma_{aa} = 0$, то функція Фойгта зводиться до доплерівського контуру (15.3) $H(0, v) = e^{-v^2}$, і для $R(q, q')$ отримуємо зовсім простий вираз:

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{N}{V} \omega \omega'^3 (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \frac{e^{-M(\omega - \omega')^2 / 2T} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2\pi T/M}} \\ \times \sum_a \rho_a \left| \frac{1}{2} \sum_c \frac{f_{ca}}{\omega_{ac}} \left(\frac{1}{\omega_{ac} - \omega'} + \frac{1}{\omega_{ac} + \omega} \right) \right|^2. \quad (47.10)$$

Для одержання цього виразу ми могли пройти коротший шлях, виконуючи процедуру усереднення за кутами (47.6) ще у функції $\Phi_{A'A}(q, q')$, означеній формулою (46.9):

$$\Phi_{A'A}(q, q') = \delta_{a'a} \delta(\mathbf{P}/\hbar + \mathbf{k} - \mathbf{P}'/\hbar - \mathbf{k}') (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \\ \times \left| 1 - \frac{1}{2} \sum_c \omega_{ac} f_{ca} \left(\frac{1}{\omega_{ac} - \omega_{k'}} + \frac{1}{\omega_{ac} + \omega_k} \right) \right|^2. \quad (47.11)$$

Використаймо тепер правило сум (24.4) для сил осцилятора

$$\sum_c f_{ca} = 1$$

і запишімо вираз під знаком модуля в (47.11) так:

$$1 - \frac{1}{2} \sum_c \omega_{ac} f_{ca} \left(\frac{1}{\omega_{ac} - \omega_{k'}} + \frac{1}{\omega_{ac} + \omega_k} \right) \\ = \sum_c f_{ca} - \frac{1}{2} \sum_c \omega_{ac} f_{ca} \left(\frac{1}{\omega_{ac} - \omega_{k'}} + \frac{1}{\omega_{ac} + \omega_k} \right) \\ = \frac{1}{2} \sum_c f_{ca} \left(\frac{\omega_k}{\omega_{ac} + \omega_k} - \frac{\omega_{k'}}{\omega_{ac} - \omega_{k'}} \right). \quad (47.12)$$

Остаточна функція

$$\begin{aligned} \Phi_{A'A}(q, q') &= \delta_{a'a} \delta(\mathbf{P}/\hbar + \mathbf{k} - \mathbf{P}'/\hbar - \mathbf{k}') (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \\ &\times \left| \frac{1}{2} \sum_c f_{ca} \left(\frac{\omega_k}{\omega_{ac} + \omega_k} - \frac{\omega_{k'}}{\omega_{ac} - \omega_{k'}} \right) \right|^2. \end{aligned} \quad (47.13)$$

Тепер шукана функція перерозподілу за частотами, означена рівнянням (8.4), набуває вигляду:

$$\begin{aligned} R(q, q') &= \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N \omega'}{V \omega} \sum_a \rho_a \int d\mathbf{P} \frac{e^{-\mathbf{P}^2/2MT}}{(2\pi MT)^{3/2}} \\ &\times \delta \left(\frac{\mathbf{P}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{M} + \omega' - \omega \right) (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \\ &\times \left| \frac{1}{2} \sum_c f_{ca} \left(\frac{\omega}{\omega_{ac} + \omega} - \frac{\omega'}{\omega_{ac} - \omega'} \right) \right|^2. \end{aligned} \quad (47.14)$$

Як і раніше при інтегруванні за компонентами вектора \mathbf{P} , виберемо вісь z уздовж вектора $(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. Тоді інтегрування за P_x та P_y дає множник $2\pi MT$, а інтегрування за P_z знімає дельта-функцію:

$$\begin{aligned} R(q, q') &= \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N \omega'}{V \omega} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \\ &\times \sqrt{\frac{M}{2\pi T}} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} e^{-M(\omega - \omega')^2/2T|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \\ &\times \sum_a \rho_a \left| \frac{1}{2} \sum_c f_{ca} \left(\frac{\omega}{\omega_{ac} + \omega} - \frac{\omega'}{\omega_{ac} - \omega'} \right) \right|^2. \end{aligned} \quad (47.15)$$

Причиною того, що формули (47.10), (47.15) не збігаються, є те, що в першому випадку ми робили точні перетворення виразу під знаком модуля у функції $R(q, q')$ і потім усереднювали за

кутами, а в другому — це усереднення виконано на проміжному етапі перетворень у функції $\Phi_{A'A}(q, q')$ і без використання закону збереження енергії, який забезпечує дельта-функція в $R(q, q')$.

Неважно, однак, переконатись, що вирази (47.10) та (47.15) для функції $R(q, q')$ відрізняються не суттєво внаслідок того, що її величину визначають близькі значення частот ω та ω' . Контур функції $R(q, q')$ визначається, в основному, гауссівською функцією у виразах (47.10) та (47.15), тобто тепловим та мікротурбулентним ефектом Доплера, тому в біляекспонентних множниках можна покласти $\omega = \omega'$, і тоді обидві формули дають такий результат:

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \frac{e^{-M(\omega - \omega')^2 / 2T |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2\pi T/M}} \times \sum_a \rho_a \left| \sum_c \frac{\omega^2 f_{ca}}{\omega_{ac}^2 - \omega^2} \right|^2. \quad (47.16)$$

Зауважуємо, що функція (47.16) має особливість при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, тобто коли частоти падаючого і розсіяного фотона збігаються, $\omega = \omega'$, а кут розсіяння дорівнює нулеві, $\vartheta = 0$ (розсіяння вперед). Ця особливість відповідає когерентному розсіянню. Зважаючи на неї, покладаємо при $\omega \simeq \omega'$ вираз (47.4) рівним

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = \frac{\omega}{c} \sqrt{2(1 - \cos \vartheta)} = \frac{2\omega}{c} \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (47.17)$$

Тепер з (47.16) маємо

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \sum_a \rho_a \left| \sum_c \frac{\omega^2 f_{ca}}{\omega_{ac}^2 - \omega^2} \right|^2 \times \sqrt{\frac{Mc^2}{8\pi T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2}} \exp \left[-\frac{Mc^2(\omega - \omega')^2}{8T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2} \right]. \quad (47.18)$$

Якщо покласти $\vartheta \rightarrow 0$ (розсіяння вперед), то, використовуючи

одне із зображень дельта-функції [8]

$$\delta(x) = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{e^{-x^2/\nu}}{\sqrt{\pi\nu}}, \quad (47.19)$$

з виразу (47.18) отримуємо функцію перерозподілу за частотами для когерентного розсіяння

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \times \sum_a \rho_a \left| \sum_c \frac{\omega^2 f_{ca}}{\omega_{ac}^2 - \omega^2} \right|^2 \delta(\omega - \omega'). \quad (47.20)$$

Кожен із наведених вище наближених виразів для функції $R(q, q')$ має свої межі застосовності, і на практиці при обчисленні профілів конкретних спектральних ліній їх потрібно ретельно вивчати.

Звертаємо увагу на те, що так зване наближення повного перерозподілу за частотами, коли функцію $R(q, q')$ зображують добутком двох функцій, одна з яких залежить лише від q , а інша — від q' (чи ω і ω'), як видно з (46.18) або (47.15), не має ніякого мікроскопічного обґрунтування. Тому важко очікувати від такого феноменологічно накинута на $R(q, q')$ наближення правильного опису тонких деталей профілів спектральних ліній.

§ 48. Розсіяння на вільних зарядах

Переходимо до обчислення коефіцієнта розсіяння електромагнітного випромінювання вільними зарядами. Для визначеності будемо говорити про розсіяння електронами. Вихідними виразами є формула (8.5) для коефіцієнта розсіяння $\sigma(q)$ та функція перерозподілу за частотами $R(q, q')$, яку ми розраховували в попередньому параграфі.

Якщо частинка, що розсіює фотони, є вільною і внутрішні ступені вільності відсутні, то у виразі (47.15) для функції перерозподілу за частотами формально покладаємо $\omega_{ac} = 0$ і, враховуючи правило сум для сил осцилятора f_{ca} та покладаючи масу $M = m$, знаходимо:

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \frac{\omega'}{\omega} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \times \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} e^{-m(\omega - \omega')^2 / 2T |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}, \quad (48.1)$$

очевидно також, що

$$\sum_a \rho_a = 1.$$

Якщо вважати розсіяння близьким до когерентного, то використаємо вираз (47.18):

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \times \sqrt{\frac{mc^2}{8\pi T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2}} \exp \left[-\frac{mc^2(\omega - \omega')^2}{8T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2} \right]. \quad (48.2)$$

Обчислимо з цим виразом коефіцієнт розсіяння. З (8.5) та (48.2) маємо:

$$\begin{aligned} \sigma(q) &= \sum_{\alpha'} \int d\Omega' \int_0^\infty d\omega' R(q, q') \quad (48.3) \\ &= \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \sum_{\alpha'} \int d\Omega' (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\sqrt{mc^2/8T \sin^2 \vartheta/2}}^\infty e^{-x^2} dx, \end{aligned}$$

де нова змінна інтегрування

$$x = (\omega' - \omega) \sqrt{\frac{mc^2}{8T\omega^2 \sin^2 \vartheta/2}}.$$

Оскільки при температурі T , що відповідає температурі зоряної атмосфери, величина

$$\frac{mc^2}{8T \sin^2 \vartheta/2} \gg 1$$

для будь-якого кута розсіяння ϑ , то нижню межу в інтегралі за x можна відтягнути до безмежності, і тоді результат інтегрування дорівнює $\sqrt{\pi}$. Таким чином, коефіцієнт розсіяння

$$\sigma(q) = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \sum_{\alpha'} \int d\Omega' (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2. \quad (48.4)$$

Обчислимо суму за поляризаціями

$$\sum_{\alpha'} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 = (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha} \mathbf{e}_{\mathbf{k}',1})^2 + (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha} \mathbf{e}_{\mathbf{k}',2})^2 = \cos^2 \alpha + \cos^2 \beta.$$

Тут уведено напрямні косинуси одиничного вектора поляризації $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha}$ падаючого випромінювання в декартових координатах, напрямки осей яких визначені трійкою векторів $(\mathbf{e}_{\mathbf{k}',1}, \mathbf{e}_{\mathbf{k}',2}, \mathbf{k}')$:

$$\cos \alpha = (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha}, \mathbf{e}_{\mathbf{k}',1}), \quad \cos \beta = (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha}, \mathbf{e}_{\mathbf{k}',2}), \quad \cos \theta = \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\alpha}, \mathbf{k}')}{|\mathbf{k}'|}.$$

Кут θ — це кут між напрямком поляризації падаючої хвилі і напрямком розсіяння. Використаймо теорему Піфагора

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \theta = 1$$

і отримаємо, що

$$\sum_{\alpha'} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 = \sin^2 \theta. \quad (48.5)$$

Нарешті з (48.4) маємо, що

$$\begin{aligned}\sigma(q) &= \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{N}{V} \int d\Omega' \sin^2 \theta \\ &= \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{N}{V} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sin^2 \theta,\end{aligned}\quad (48.6)$$

і після елементарного інтегрування знаходимо коефіцієнт розсі-
яння

$$\sigma(q) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{N}{V}.\quad (48.7)$$

Цей вираз (без множника N/V) відомий як формула Томсона для перерізу розсіяння, і тому часто розсіяння світла на вільних електронах називають томсонівським³.

Формула Томсона описує розсіяння не лише вільними елек-
тронами, а й тими, які входять до складу атомів, якщо частота ω є значно більшою, ніж власні частоти атома ω_{ac} . Отже, коли $|\omega_{ac}| \ll \omega$, то за цих умов електрони можемо вважати вільними, і з формули (47.15) ми знову приходимо до (48.1). Класичною мовою можна говорити про те, що сила, яка діє на заряд з бо-
ку зовнішнього електромагнітного поля, є значно більшою, ніж сили, що утримують електрон у зв'язаному стані в атомі, і тому він розсіює як вільний заряд. Саме тому величина $\sigma(q)$ з (48.7) вже не залежить ні від частоти ω , ні від характеристик атома. Для дуже високих частот наші формули незастосовні, оскільки розрахунки потрібно вести методами квантової електродинамі-
ки з урахуванням релятивістських ефектів (формула Кляйна–
Нішіни для ефекта Комптона). Однак, як ми вже неодноразово підкреслювали, фізичні умови в зоряних атмосферах є такими,

³Джозеф Джон Томсон (1856–1940) — англійський фізик. Відкрив електрон і виміряв величину його заряду (Нобелівська премія 1906 року), у класичній теорії розсіяння розраховував ефективний переріз розсіяння світла вільними електронами (формула Томсона).

що релятивістські ефекти несуттєві і їх можна не брати до уваги при вивченні атомних спектральних ліній.

Розсіяння вільними електронами стає ефективним і може конкурувати з фотойонізацією в атмосферах гарячих зір, коли, згідно з розподілом Больцмана, кількість йонізованих атомів, а отже, й електронів, є значною.

§ 49. Релєївське розсіяння на атомах

При дослідженні зоряних атмосфер з достатньо низькими температурами, такими, що в них можуть існувати не лише атоми, а й молекули, важливо враховувати розсіяння фотонів з короткохвильової ділянки спектра на електронах у зв'язаних станах.

Якщо частоти падаючого і розсіяного світла ω, ω' є значно меншими за власні частоти атомів чи молекул середовища, то з формули (47.10) для функції перерозподілу за частотами знаходимо:

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega \omega'^3 (\mathbf{e}_q \mathbf{e}'_q)^2 \sum_a \rho_a \left(\sum_c \frac{f_{ca}}{\omega_{ac}^2} \right)^2 \times \frac{e^{-M(\omega - \omega')^2 / 2T} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \sqrt{2\pi T/M}}. \quad (49.1)$$

Цю формулу можна, очевидно, отримати і з іншого наближеного рівняння (47.15), якщо попередньо під знаком суми за c зробити елементарні перетворення і зважити на те, що відносна різниця частот $(\omega - \omega')/|\omega_{ac}| \ll 1$, оскільки експонента “ріже” внесок від великих значень $(\omega - \omega')$, а крім того, використати умови, що $|\omega_{ac}| \gg \omega$ та $|\omega_{ac}| \gg \omega'$:

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{\omega_{ac} + \omega} - \frac{\omega'}{\omega_{ac} - \omega'} &= \frac{\omega_{ac}(\omega - \omega') - 2\omega\omega'}{(\omega_{ac} + \omega)(\omega_{ac} - \omega')} \rightarrow \\ \rightarrow -\frac{2\omega\omega'}{(\omega_{ac} + \omega)(\omega_{ac} - \omega')} &\rightarrow -2\frac{\omega\omega'}{\omega_{ac}^2}. \end{aligned}$$

Для розсіяння, яке є близьким до когерентного, функція (49.1) зводиться до

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega^4 (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \sum_a \rho_a \left(\sum_c \frac{f_{ca}}{\omega_{ac}^2} \right)^2 \times \sqrt{\frac{Mc^2}{8\pi T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2}} \exp \left[-\frac{Mc^2(\omega - \omega')^2}{8T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2} \right]. \quad (49.2)$$

Зрозуміло, що цей вираз також можна було зразу виписати з (47.18) за умови, що $\omega \ll |\omega_{ac}|$.

Розрахуймо тепер коефіцієнт розсіяння σ з (8.5), використовуючи формулу (47.18) і повторюючи вправи з попереднього параграфа:

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \omega^4 \sum_a \rho_a \left(\sum_c \frac{f_{ca}}{\omega_{ac}^2 - \omega^2} \right)^2. \quad (49.3)$$

Якщо всі атоми перебувають, наприклад, в основному стані $|a\rangle$, то, використовуючи квантовомеханічний вираз для показника заломлення $n(\omega)$ системи розсіюючих атомів [8],

$$n^2(\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \frac{N}{V} \sum_c \frac{f_{ca}}{\omega_{ac}^2 - \omega^2}, \quad (49.4)$$

формулу (49.3) можна переписати так:

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N}{V} \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 \left[n^2(\omega) - 1 \right]^2, \quad (49.5)$$

де

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 N}{mV}}.$$

Цю формулу, згідно з якою при низьких частотах (порівняно з власними частотами атома) коефіцієнт розсіяння пропорційний до четвертого степеня частоти, уперше вивів Дж. Релей, і вона

відома як закон Релея, а таке розсіяння називають релеївським⁴. Воно може відігравати важливу роль в ультрафіолетовій ділянці поглинання для зоряних атмосфер, які є достатньо холодними, щоб забезпечити існування в них як атомів, так і молекул. Насамперед ідеться про розсіяння на нейтральному атомі водню та на молекулярному водні H_2 . При низьких температурах молекулярне релеївське розсіяння може навіть переважати атомарне, коли молекул H_2 є більше, ніж атомів H . Релеївське розсіяння є важливим і для зір, у яких зменшена роль від'ємного йона водню H^- , тобто для зір з низьким умістом металів, що є основним джерелом вільних електронів при утворенні комплексу H^- .

§ 50. Резонансна флюоресценція

Переходимо до аналізу функції перерозподілу за частотами $R(q, q')$ та перерізу розсіяння $\sigma(q)$ для особливого випадку, коли частота падаючого світла ω (чи розсіяного ω') є близькою до однієї з власних частот атома. Отже, мова йтиме про резонансне розсіяння, яке називають ще резонансною флюоресценцією⁵. Зрозуміло, що тепер з усієї суми за квантовими числами проміжних станів $|c\rangle$, що входять в означення функції $R(q, q')$, ви-

⁴Джон Уільям Релей (1842–1919) — англійський фізик із широком колом зацікавлень, особливий внесок зробив в оптику та акустику. За дослідження густин газоподібних елементів і відкриття аргону його разом з англійським фізиком і хіміком Уільямом Рамзаєм нагороджено Нобелівською премією 1904 року.

Своєю знаменитою формулою розсіяння світла лорд Релей пояснив і голубий колір неба, і червоний колір Сонця, що заходить. Чарівна краса голубого неба — це просто розсіяне молекулами повітря світло Сонця, яке, згідно з формулою Релея, втрачає сині й фіолетові промені, а мірою того як Сонце заходить і промені проходять усе більшу товщу повітря, залишаються оранжеві, а потім лише червоні промені. Глибоке естетичне задоволення й душевні переживання людини від безодні синього неба та гри його кольорів під час заходу Сонця, які багаторазово оспівували поети і змальовували художники, виявляється, закладені у простій фізичній формулі: $\sigma \sim \omega^4$.

⁵Флюоресценцією (від лат. *fluor* — потік та ... *escentia* — суфікс, що означає слабку дію) називають короткочасне ($10^{-8} \div 10^{-9}$ сек) висвічування фотонів атомами речовини на шляху поширення збуджуючого світла.

значальним є лише один доданок, у якому власна частота атома $\omega_{ca} \simeq \pm\omega$.

Для опису явища флюоресценції ми не можемо користуватись безпосередньо формулами з попереднього параграфу, оскільки зустрінємось з проблемою “нуль у знаменнику”. Тому повертаємось до вихідної формули (46.18) і підемо тим самим шляхом, який привів нас до (47.7), але при цьому збережемо в знаменниках сталу загасання γ_{ac} .

Нехай атом знаходиться в “нижньому” стані $|a\rangle$ (наприклад, це може бути його основний стан), частота падаючого світла ω є близькою до резонансної частоти $\omega_0 = \omega_{ca}$, а розсіяння майже когерентне, тобто $\omega' \simeq \omega$:

$$R(q, q') = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \sum'_a \rho_a \frac{H(\alpha, v)}{\sqrt{2\pi T/M} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \times \left| \frac{\sum'_c f_{ca} \omega_0}{2(\omega - \omega' - i\gamma/2)} \right|^2. \quad (50.1)$$

Тут стала загасання $\gamma = \gamma_{ac}$ враховує як природну ширину лінії, так і загасання атомних станів унаслідок міжчастинкової взаємодії; штрихи біля суми за квантовими числами a та c означають, що підсумовування відбувається за виродженими станами з енергіями E_a та E_c . Тому сума за $|c\rangle$ -станами під знаком модуля в (50.1) “перестрибнула” до чисельника. Отже, вираз $\sum'_c f_{ca}$ дорівнює силі осцилятора, заздалегідь підсумованій за квантовими числами стану $|c\rangle$, від яких енергія E_c не залежить. Пригадаймо у зв'язку з цим з § 26 та § 27 сили осцилятора для атома водню, заздалегідь підсумовані за магнітним квантовим числом.

Використаймо тепер вираз (11.4) для радіаційної сталої загасання стану $|c\rangle$, яку формують спонтанні переходи,

$$\gamma_0 = \frac{2e^2\omega_0^2}{mc^3} f_{ca},$$

і перепишімо формулу (50.1) так:

$$R(q, q') = \left(\frac{c}{4\omega}\right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \sum_a' \rho_a \frac{H(\alpha, v)}{\sqrt{2\pi T/M} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \times \frac{\gamma_0^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (50.2)$$

У резонансі $\omega = \omega_0$ проблема “нуль у знаменнику” відсутня:

$$R(q, q') = \left(\frac{c}{2\omega}\right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \times \sum_a' \rho_a \frac{H(\alpha, v)}{\sqrt{2\pi T/M} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma}\right)^2. \quad (50.3)$$

Якщо $\alpha \rightarrow 0$, тобто $\gamma_a \rightarrow 0$, і ми вважаємо стан $|a\rangle$ стаціонарним, а не квазістаціонарним, то з (50.2) за умови, що розсіяння є близьким до когерентного, використовуючи наведені в попередніх параграфах обґрунтування відповідних спрощень наших формул, для функції перерозподілу знайдемо:

$$R(q, q') = \left(\frac{c}{4\omega}\right)^2 \frac{N}{V} (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 \frac{\gamma_0^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \times \sqrt{\frac{mc^2}{8\pi T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2}} \exp\left[-\frac{mc^2(\omega - \omega')^2}{8T \omega^2 \sin^2 \vartheta/2}\right], \quad (50.4)$$

де ϑ — кут розсіяння, $\vartheta = \widehat{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$.

Обчислимо тепер з виразом (50.2) коефіцієнт розсіяння, що, як і функція перерозподілу за частотами, також уходить до рівняння переносу випромінювання:

$$\begin{aligned} \sigma(q) &= \sum_a' \int d\Omega' \int_0^\infty d\omega' R(q, q') \\ &= \left(\frac{c}{4\omega}\right)^2 \frac{N}{V} \sum_a' \rho_a \int (\mathbf{e}_q \mathbf{e}_{q'})^2 d\Omega' \end{aligned}$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dv H(\alpha, v) \frac{\gamma_0^2}{(\omega - \omega_0) + (\gamma/2)^2}. \quad (50.5)$$

Тут ми скористались означенням змінної v з (47.9) з урахуванням (47.17), крім того, нижню межу, як і при аналогічних обчисленнях у (48.3), відтягнули на безмежність.

Беручи до уваги в (50.5) умову нормування (15.2) для функції Фойгта та статистичної ваги ρ_a після знайомих уже підсумовування за поляризаціями α' та інтегрування за кутами, отримуємо остаточний результат:

$$\sigma(q) = \frac{2\pi}{3} \left(\frac{c}{\omega}\right)^2 \frac{N}{V} \frac{(\gamma_0/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (50.6)$$

При точному резонансі і якщо не зважати на розширення ліній міжчастинковими взаємодіями ($\gamma = \gamma_0$), коефіцієнт розсіяння досягає максимального значення

$$\sigma(q) = \frac{2\pi}{3} \left(\frac{c}{\omega}\right)^2 \frac{N}{V}, \quad (50.7)$$

яке пропорційне квадратові довжини хвилі $\lambda = 2\pi c/\omega$ падаючого випромінювання.

РОЗДІЛ VIII

АНАЛІЗ ЗОРЯНИХ АТМОСФЕР

§ 51. Розв'язок рівняння переносу випромінювання

Ми підійшли впритул до нашого основного завдання, сформульованого в першому параграфі, — дослідити механізми утворення спектральних ліній атомів у зоряних атмосферах і тим самим зробити можливим розшифрування химерного мережива зоряного спектра. У попередніх розділах ми детально вивчали коефіцієнти поглинання в спектральній лінії та в неперервному спектрі, коефіцієнт розсіяння електромагнітного випромінювання, функцію розподілу за частотами, а також такі величини як стала загасання, сили осцилятора та інші. Тепер переходимо до проблеми утворення ліній поглинання у спектрі зорі. Для цього насамперед потрібно розв'язати рівняння переносу випромінювання, які було виведено в першому розділі.

Причому оскільки нашою метою є не прецизійні дослідження конкретних космічних об'єктів, а лише демонстрація того, як підійти до аналізу зоряної атмосфери на підставі цих рівнянь, то будемо дотримуватись гіпотези локальної термодинамічної рівноваги. Якщо ця гіпотеза не підтверджується для тих чи інших об'єктів, то потрібно розв'язувати рівняння переносу випромінювання (6.1), у яке входить функція джерела $S_{AA'}(\omega)$. Функцію джерела, своєю чергою, знаходять шляхом розв'язку рівнянь для ймовірностей заселеностей ρ_A атомних станів. А останні рівняння конструюють як кінетичні рівняння, обчислюючи ймовірності квантових переходів атома з одного стану в інший з урахуванням міжатомних зіткнень та взаємодії з електромагнітним випромінюванням.

Почнімо з розв'язку рівняння переносу випромінювання в наближенні однофотонних переходів (6.5) або (6.8). Тобто в цьому параграфі поки що ми обмежуємось процесами істинного поглинання. Далі вважаємо, що атмосфера зорі має плоскопаралельну геометрію, тобто складається з плоскопаралельних шарів, як це зображено на рис. 5.

Таким чином, нам потрібно знайти розв'язок такого рівняння:

$$\cos \theta \frac{dI_q}{dz} = -\varkappa(q)[I_q - B_{\omega, \alpha}(T)]. \quad (51.1)$$

Розв'язуємо його методом варіації сталої. Покладаючи спочатку $B_{\omega, \alpha}(T) = 0$, легко знаходимо

$$I_q = C e^{-\int_0^z \varkappa(q) dz' / \cos \theta}. \quad (51.2)$$

Пригадаймо собі, що величина $\varkappa(q)$ є функцією не лише частоти ω та поляризації α , а також і координати z . Остання залежність зумовлена зміною густини атомів N/V та локальної температури T уздовж напрямку осі z , яка перпендикулярна до шарів атмосфери. Початок відліку $z = 0$ беремо на глибині, де починається фотосфера, тобто той шар атмосфери, де формується спостережуваний спектр (див. рис. 5).

Уважаємо тепер “сталу” C функцією z і, підставляючи (51.2) в (51.1), знаходимо для неї таке рівняння:

$$\cos \theta \frac{dC}{dz} = \varkappa(q) B_{\omega, \alpha}(T) e^{\int_0^z \varkappa(q) dz' / \cos \theta}. \quad (51.3)$$

Звідси:

$$C = \int_0^z dz' \frac{\varkappa(q)}{\cos \theta} B_{\omega, \alpha}(T) e^{\int_0^{z'} \varkappa(q) dz'' / \cos \theta} + C_1, \quad (51.4)$$

тут C_1 — нова, поки що не визначена, “справжня” стала. З формули (51.2) з урахуванням (51.4) знаходимо шуканий розв'язок

рівняння (51.1):

$$\begin{aligned}
 I_q(z) &= e^{-\int_0^z \kappa(q) dz'' / \cos \theta} \int_0^z dz' \frac{\kappa(q)}{\cos \theta} B_{\omega, \alpha}(T) e^{\int_0^{z'} \kappa(q) dz'' / \cos \theta} \\
 &+ C_1 e^{-\int_0^z \kappa(q) dz'' / \cos \theta}.
 \end{aligned} \tag{51.5}$$

Ми запроваджуємо тут позначення $I_q = I_q(z)$, щоб явно відзначити залежність від координати z інтенсивності випромінювання I_q , яке поширюється крізь атмосферу зорі з її надр у навколишній простір. З початкової умови при $z = 0$ знаходимо, що $C_1 = I_q(0)$, і остаточно наш розв'язок набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
 I_q(z) &= I_q(0) e^{-\int_0^z \kappa(q) dz'' / \cos \theta} \\
 &+ \int_0^z dz' \frac{\kappa(q)}{\cos \theta} B_{\omega, \alpha}(T) e^{-\int_{z'}^z \kappa(q) dz'' / \cos \theta}.
 \end{aligned} \tag{51.6}$$

Прокоментуємо цей розв'язок. Перший доданок у (51.6) описує послаблення початкового випромінювання, що йде з надр зорі ($z = 0$) внаслідок його поглинання атомами мірою проходження крізь атмосферу. Другий доданок — це інтенсивність випромінювання, винесеного на площину z , яке випромінюється на шляху від $z = 0$ до z з послабленням унаслідок поглинання від місця випромінювання z' до точки z .

Ми будемо цікавитись розв'язком, який дає інтенсивність випромінювання, що виходить із зорі й випромінюється в навколишній простір. Залишаємо поза увагою випромінювання, що йде ззовні всередину і, зокрема, коли зоряне середовище освітлюється зовнішнім випромінюванням.

Уведемо поняття оптичної глибини в атмосфері зорі. Виберімо

деяку площину з координатою z_0 , покладімо

$$\tau = \int_z^{z_0} \kappa(q) dz' \quad (51.7)$$

і назвімо цю величину оптичною відстанню від z_0 до z . Для різних частот оптична відстань різна, оскільки величина τ залежить не лише від z , а, як і коефіцієнт поглинання $\kappa(q)$, від ω та α :

$$\tau = \tau(\omega, \alpha, z). \quad (51.8)$$

Ця величина дорівнює відстані від площини z_0 , вимірної в довжинах вільного пробігу $\kappa(q)^{-1}$ фотона, що має частоту ω і поляризацію α . Образно кажучи, величина τ є кількісною характеристикою того, як далеко в глибину атмосфери зорі бачить спостерігач, око якого розташоване в деякій точці на площині $z = z_0$. Чим більше τ , тобто чим більша оптична товщина середовища, тим менша кількість фотонів проходить крізь нього.

Якщо відтягнути спостерігача на безмежність, $z_0 = \infty$, то величину

$$\tau = \int_z^{\infty} \kappa(q) dz' \quad (51.9)$$

називають оптичною глибиною. Оптична глибина змінюється в таких межах:

$$\tau = \begin{cases} \tau_0, & z = 0 \\ 0, & z = \infty \end{cases}, \quad (51.10)$$

де

$$\tau_0 = \int_0^{\infty} \kappa(q) dz'. \quad (51.11)$$

Для зоряних атмосфер величина $\tau_0 \gg 1$, тобто маємо середовище великої оптичної товщини, а отже, можна говорити про фізичну безмежність і покласти $\tau_0 = \infty$.

Корисно переписати розв'язок рівняння переносу випромінювання (51.6), використавши поняття оптичної глибини. Отже, з означення (51.9) маємо

$$d\tau = -\kappa(q) dz, \quad (51.12)$$

далі

$$\begin{aligned} \int_0^z \kappa(q) dz'' &= \int_0^\infty \kappa(q) dz'' + \int_\infty^z \kappa(q) dz'' \\ &= \tau_0 - \int_z^\infty \kappa(q) dz'' = \tau_0 - \tau, \end{aligned}$$

$$\int_{z'}^z \kappa(q) dz'' = \int_{z'}^\infty \kappa(q) dz'' + \int_\infty^z \kappa(q) dz'' = \tau' - \tau,$$

де

$$\tau' = \int_{z'}^\infty \kappa(q) dz''.$$

Тепер із (51.6), урахувавши межі інтегрування (51.10), знаходимо:

$$I_q(z) = I_q(0)e^{-(\tau_0 - \tau)} + \int_\tau^{\tau_0} d\tau' \frac{B_{\omega, \alpha}(T)}{\cos \theta} e^{-(\tau' - \tau)/\cos \theta}, \quad (51.13)$$

оскільки температура T є функцією z , а координата z залежить від τ через рівняння (51.9) і тому тут $T = T(\tau)$.

Найбільше нас цікавить випромінювання, яке виходить з атмосфери, коли $\tau = 0$. Отже, враховуючи, крім того, що фактично

$\tau_0 = \infty$, з (51.13) знаходимо:

$$I_q = \int_0^{\infty} d\tau e^{-\tau/\cos\theta} B_{\omega,\alpha}(T) / \cos\theta, \quad (51.14)$$

тут

$$I_q = I_q(z = \infty).$$

Виходячи безпосередньо з (51.6) або підставляючи в (51.14) означення оптичної глибини (51.9), цей вираз для I_q можна записати і через інтеграл за z -координатою:

$$I_q = \int_0^{\infty} dz \frac{\kappa(q) B_{\omega,\alpha}(T)}{\cos\theta} e^{-\int_z^{\infty} \kappa(q) dz' / \cos\theta}. \quad (51.15)$$

Ми отримали в розпорядження дуже компактний вираз для інтенсивності випромінювання, яке залишає зоряну атмосферу і потрапляє у прилади спостерігача. Разом з рівнянням (51.9) формула (51.14) або (51.15) дозволяє аналізувати спектри випромінювання космічних об'єктів. Зрозуміло, що для цього потрібно задати модель атмосфери, тобто необхідно мати залежність від координати z , температури T та густини частинок N/V , що складають атмосферу зорі. “Зачекайте, — скаже Читач, — але ж це і є нашим завданням: тобто, аналізуючи інтенсивність випромінювання, яке потрапляє до нас, ми повинні відтворити фізичні умови зоряного середовища та його хімічний склад.”

Ми опинились у тенетах так званої оберненої задачі, яка належить до класу некоректних. Потрібно так підібрати температуру й густину частинок у кожній точці атмосфери, щоб, проінтегрувавши (51.15) або (51.14), (51.9), отримати спостережувану інтенсивність випромінювання I_q . Отже, вибравши певну модель атмосфери, обчислюємо інтенсивність I_q . Якщо вона не збігається зі спостережуваною, то вносимо зміни в цю модель і так продовжуємо, поки обчислену інтенсивність не “підженемо” до спостережуваної. Зрозуміло, що ходячи по цьому зачарованому колу, ми одразу зіткнемося з питанням про однозначність

розв'язку для I_q . А саме, чи не матимуть дві різні моделі атмосфери, хоча і досить близькі між собою, але які відрізнятимуться суттєвими для нас деталями, ту ж саму інтенсивність I_q . Адже очевидно, що означені інтеграли від різних функцій можуть давати той самий результат: наприклад, інтеграли в безмежних межах від $\sin(x^2/2)$ і e^{-x^2} дорівнюють $\sqrt{\pi}$. Інтуїтивно ми сподіваємось, що певний ступінь однозначності все ж таки є, хоча довести це строго неспромога¹.

§ 52. Глибини та еквівалентні ширини спектральних ліній

Розв'язавши рівняння переносу випромінювання й маючи у своєму розпорядженні значення інтенсивності I_q , ми можемо до-

¹Наведемо побутовий приклад оберненої задачі. Нехай Ви купили річ, що коштує 7 гривень і 7 копійок. Запитаємо: якими купюрами Ви розрахувались, якщо отримали решту $\Delta = 2$ грн. 93 коп. Очевидно, що Ви дали продавцеві 10 гривень. Однак це не означає, що Ви дали одну купюру в 10 грн. Це могли бути і дві купюри по 5 грн. (Ми, зрозуміло, керуємось здоровим глуздом і не приймаємо розв'язки типу п'ять купюр по 2 грн. або десять по 1 грн., оскільки при цьому продавцеві зразу можна дати 8 грн.). Отже, після “взаємодії” покупця з продавцем за наслідком “решта дорівнює 2 грн. 93 коп.” ми не спроможні однозначно відтворити механізм оплати.

Ми можемо ускладнити ситуацію, поклавши $\Delta = 93$ коп. Тобто покупець дав 8 грн. Нехай по одній гривні було x купюр, по 2 гривні — y купюр та z купюр — по 5 гривень. Повинна виконуватись умова $8 = 1x + 2y + 5z$. Тепер розв'язків аж сім: $x = 0, y = 4, z = 0$; $x = 1, y = 1, z = 1$; $x = 2, y = 3, z = 0$; $x = 3, y = 0, z = 1$; $x = 4, y = 2, z = 0$; $x = 6, y = 1, z = 0$; $x = 8, y = 0, z = 0$. Що треба для того, щоб знайти однозначний розв'язок задачі? Відповідь: потрібна додаткова інформація. Наприклад, якщо відомо, що купюр було п'ять, то маємо однозначний розв'язок $x = 2, y = 3, z = 0$.

Однозначний розв'язок отримаємо і без додаткових умов, але якщо $\Delta = 12$ грн. 93 коп.: тоді покупець у цьому випадку дав одну купюру у 20 грн. (однозначність маємо для початкових купюр у 50 і 100 грн., коли $\Delta = 42$ грн. 93 коп. і $\Delta = 92$ грн. 93 коп.).

Мистецтво вченого при відтворенні механізмів фізичних явищ полягає в тому, щоб із побічних фактів винайти додаткові умови, які й дозволяють зафіксувати однозначний розв'язок задачі.

Прикладом некоректної задачі є і пошук організації життя суспільства. Кожного разу розв'язок для подальшого розвитку знаходять за допомогою насильницького підпорядкування додатковій умові, тобто закону.

сліджувати контури атомних спектральних ліній поглинання. Знову починаємо наш аналіз з простого випадку, нехтуючи двофотонними переходами, тобто процесами розсіяння й перерозподілу за частотами, коли можна отримати деякі важливі результати без розрахунків.

Беручи до уваги означення (2.9) глибини лінії r_λ для Сонця та вираз (51.15) для інтенсивності $I_q = I_q(z = \infty)$, знаходимо, що

$$r_\lambda = \frac{I_q^c - I_q^l}{I_q^c} = \frac{1}{I_q^c \cos \theta} \int_0^\infty dz \kappa^c(q) B_{\omega, \alpha}(T) e^{-\int_z^\infty \kappa^c(q) dz' / \cos \theta} \times \left\{ 1 - \left[1 + \frac{\kappa^l(q)}{\kappa^c(q)} \right] e^{-\int_z^\infty \kappa^l(q) dz' / \cos \theta} \right\}, \quad (52.1)$$

де

$$I_q^c = \int_0^\infty dz \frac{\kappa^c(q) B_{\omega, \alpha}(T)}{\cos \theta} e^{-\int_z^\infty \kappa^c(q) dz' / \cos \theta}, \quad (52.2)$$

а значки “ c ” та “ l ” біля $\kappa(q)$ позначають коефіцієнт поглинання в неперервному спектрі та в спектральній лінії. Глибину лінії ми позначаємо індексом λ , підкреслюючи її залежність від довжини хвилі. Те, що в її означення входить функція Планка $B_{\omega, \alpha}$, нормована на частоту, не повинно нас турбувати, оскільки r_λ є знерозміреною величиною і в знаменник (52.1) також уходить функція Планка через інтенсивність I_q^c . У результаті нормувальні множники функції Планка скорочуються і перехід до шкали довжин хвиль відбувається простою заміною $\omega = 2\pi c/\lambda$.

Вираз (52.1) дає профіль лінії залежно від довжини хвилі (або частоти) для різних значень кута θ . Пригадаймо, що кут $\theta = 0$ відповідає центрові диска Сонця, а $\theta = \pi/2$ — точкам на лімбі. Далеко від резонансної довжини хвилі λ_0 , коли поглинання в лінії відсутнє і $\kappa^l(q) = 0$, глибина ліній $r_\lambda = 0$. Навпаки, для сильного поглинання в лінії $\kappa^l(q) \rightarrow \infty$ і глибина $r_\lambda \rightarrow 1$ (абсолютно чорна лінія).

Підінтегральна функція в (52.1) має максимум для деякого значення змінної $z = \bar{z}$, і отже головний внесок у формування спектральної лінії дають глибини z біля \bar{z} . Насправді лінія утворюється в усьому шарі фотосфери, і така величина, як глибина утворення спектральної лінії, є скоріше зручним якісним поняттям, ніж кількісною характеристикою механізму формування зоряного спектра².

Підінтегральний вираз у (52.1) прийнято називати функцією внеску в глибину спектральної лінії, або просто функцією внеску. Інтегруванням частинами в (52.1) можна отримати інші функції внеску, характер залежностей яких від змінної z різний, дають вони й різні глибини утворення ліній, хоча, зрозуміло, приводять до того ж самого інтегрального результату для r_λ . Отже, існує цілий “зоопарк” таких функцій внеску, і питання про те, на якій глибині в атмосфері зорі утворюються атомні спектральні лінії, має зміст, якщо мова йде про якісні оцінки. Робити категоричні висновки на підставі розрахунків з різними функціями внеску, надаючи перевагу одним над іншими, нав'язуючи одним більший фізичний зміст, ніж іншим, нам видається нерозсудливим³. У 1980-х роках на “Сонячних” конференціях дискусії з цього питання набували часом драматичного характеру.

²Може, це й зайве зауваження, але просимо Читача розрізняти глибину утворення спектральної лінії в атмосфері зорі \bar{z} і глибину самої лінії r_λ як її кількісну характеристику.

³Для ілюстрації сказаного наведемо простий приклад. Підінтегральна функція (“функція внеску”) у виразі $\int_0^\infty e^{-z} dz = 1$ досягає максимального значення в точці $\bar{z} = 0$. Інтегруванням частинами зводимо цей інтеграл до $\int_0^\infty z e^{-z} dz = 1$, де “функція внеску” має максимум при $\bar{z} = 1$. Інтегруючи далі n -разів частинами вихідний вираз, генеруємо цілий ланцюжок “функцій внеску” $z^n e^{-z} / n!$ з максимумами в точках $\bar{z} = n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Вибравши на свій смак одну з цих “функцій внеску”, можна різними міркуваннями доводити, що вона є “більш фізичною”, ніж інша. Безпідставність цих тверджень, як і висновків про глибини утворення ліній, видаються очевидними: якщо, наприклад, прийняти, що кращими “функціями внеску” є функції з великими n , то виходить, що спектральна лінія утворюється на глибині $\bar{z} = \infty$, $n \rightarrow \infty$, тобто в оці спостерігача.

Важливою характеристикою спектральної лінії є залежність її глибини r_λ від кількості поглинаючих атомів в одиниці об'єму N_a/V , які перебувають у квантовому стані $|a\rangle$, причому $N_a = \rho_a N$, де N — повне число атомів. Оскільки коефіцієнт поглинання в лінії (13.18) залежить від N_a в добутку із силою осцилятора $f_{aa'}$, то говоритимемо про величину r_λ як функцію параметра $f_{aa'} N_a/V$. Якщо ми обчислимо цю залежність теоретично, то за експериментально встановленою глибиною лінії r_λ можна буде визначити хімічний уміст атомів в атмосфері зорі.

При експериментальному вивченні зоряних спектрів здебільшого вимірюють еквівалентні ширини спектральних ліній, а не їхні профілі, особливо, коли мова йде про слабкі лінії. Для Сонця еквівалентна ширина W_λ дається виразом (2.11), для інших зір — формулою (2.12).

Чим більше атомів, що поглинають випромінювання на резонансній частоті, тим більша глибина лінії та її еквівалентна ширина. Отже, при малих значеннях N_a/V можна очікувати, що ця залежність є лінійною, а зі збільшенням числа атомів крива r_λ йде на насичення, оскільки її максимальне значення, за означенням, дорівнює одиниці: $\max r_\lambda = 1$. Залежність r_λ від $f_{a'a} N_a/V$ називають кривою насичення, а крива насичення для еквівалентної ширини W_{λ_0} має назву кривої зростання.

Для того щоб просунутись далі, потрібно мати модель зоряної атмосфери. Однією з найпростіших є так звана модель Шустера–Шварцшільда⁴, у якій вважається, що в тій ділянці атмосфери, де формується лінія, температура (і кількість поглинаючих атомів) величина стала. Інша “канонізована” модель, яку запропонували Е. Мілн⁵ та А. Еддінгтон, ґрунтується на постулюванні

⁴Шустер Артур (1851–1934) — англійський фізик. Наукові роботи присвячені оптиці, спектроскопії, електропровідності газів, земному магнетизму, сейсмології. У 1905 році А. Шустер запропонував модель інверсного шару над фотосферою Сонця, який творить фраунгоферові лінії. Карл Шварцшільд опублікував свою роботу з розсіяння і поглинання в сонячній атмосфері 1914 року.

⁵Мілн Едуард Артур (1896–1950) — англійський математик, астрофізик. Досліджував перенесення енергії внаслідок випромінювання, йонізацію речо-

лінійної залежності функції Планка (а в загальному випадку — функції джерела) від оптичної глибини τ . Свого часу створення цих моделей було природними кроками в дослідженні зоряних атмосфер, їм присвячена численна література, яку можна знайти в цитованих нами підручниках і монографіях.

Модель Шустера–Шварцшільда створила уявлення про те, що зоряна атмосфера складається з нижнього шару, який формує неперервний спектр, і верхнього, так званого інверсного, або обертаючого, шару, де власне й “народжуються” лінії поглинання — фраунгоферові лінії в спектрі Сонця. Нехай інверсний шар висотою z починається з площини $z = 0$. З (51.6), інтегруючи в припущенні, що $\varkappa(q)$ та $B_{\omega,\alpha}(T)$ не залежать від z , знаходимо

$$I_q(z) = I_q(0)e^{-\varkappa(q)z/\cos\theta} + \frac{\varkappa(q)B_{\omega,\alpha}(T)}{\cos\theta} \int_0^z e^{-(z-z')\varkappa(q)/\cos\theta} dz'$$

або

$$I_q(z) = I_q(0)e^{-\varkappa(q)z/\cos\theta} + B_{\omega,\alpha}(T) \left(1 - e^{-\varkappa(q)z/\cos\theta}\right). \quad (52.3)$$

За допомогою цієї формули обчислюємо глибину лінії на висоті z :

$$r_\lambda = \frac{I_q^c(z) - I_q^l(z)}{I_q^c(z)} = \frac{[I_q(0) - B_{\omega,\alpha}(T)] \left(1 - e^{-\varkappa^l(q)z/\cos\theta}\right)}{I_q(0) + B_{\omega,\alpha}(T) \left(e^{\varkappa^c(q)z/\cos\theta} - 1\right)}. \quad (52.4)$$

Уважаючи, що інверсний шар достатньо тонкий, так, що для неперервного поглинання виконується умова $\varkappa^c(q)z \ll 1$, остаточно маємо

$$r_\lambda = r_\lambda^0 \left(1 - e^{-\varkappa^l(q)z/\cos\theta}\right), \quad (52.5)$$

вин в атмосферах зір, зоряні спектри, внутрішню будову зір тощо. Створив так званий кінематичний варіант загальної теорії відносності, щоб пояснити явище червоного зміщення у спектрах галактик. Був Президентом Лондонського математичного товариства (1937–1939) та Президентом Королівського астрономічного товариства (1943–1945).

де максимальна глибина лінії

$$r_{\lambda}^0 = 1 - B_{\omega, \alpha}(T)/I_q(0). \quad (52.6)$$

Застосовуємо формулу (52.5) до розрахунку еквівалентної ширини лінії. За означенням (2.16),

$$W_{\lambda_0} = \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - e^{-\varkappa^l(q)z/\cos\theta}\right) d(\Delta\omega), \quad (52.7)$$

де інтегрування відбувається за різницею $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, ω_0 — резонансна частота лінії, $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$. Ми скористались тут тим, що в межах лінії r_{λ}^0 — величина стала, а інтегрування в (52.7) відбувається фактично і справді в межах ліній, і лише завдяки швидкому зменшенню коефіцієнта поглинання $\varkappa^l(q)$ поза лінією межі інтегрування розтягнуті на безмежності.

Вираз (52.7) дає залежність W_{λ_0} від густини поглинаючих атомів, тобто визначає функцію зростання. Для встановлення її явного вигляду в загальному випадку потрібно проводити чисельне інтегрування. Однак при малих і великих густинах виявляється можливим цю залежність “отримати руками”. Почнемо з малих густин, коли $\varkappa^l(q)z \ll 1$ й експоненту під інтегралом у (52.7) можна розкласти в ряд. Отже, обмежуючись лінійними за $\varkappa^l(q)$ членами і використовуючи для нього вираз (13.18), отримуємо, міркуючи так само, як і раніше, при обчисленні (29.4):

$$\begin{aligned} W_{\lambda_0} &= \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda}^0 \frac{z}{\cos\theta} \int_{-\infty}^{\infty} \varkappa^l(q) d(\Delta\omega) \quad (52.8) \\ &= \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda}^0 \frac{z}{\cos\theta} \frac{2\pi^2 e^2 N}{mcV} \rho_a f_{a'a} \left(1 - e^{-\hbar\omega_0/T}\right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H(\alpha, v) dv. \end{aligned}$$

Використаймо умову нормування (15.2) для функції Фойгта і знайдемо:

$$\frac{W_{\lambda_0}}{r_{\lambda}^0} = \lambda_0^2 \frac{z}{\cos\theta} \frac{\pi e^2 N_a}{mc^2 V} f_{a'a} \left(1 - e^{-\hbar\omega_0/T}\right). \quad (52.9)$$

Таким чином, еквівалентна ширина спектральної лінії виявляє, як і передбачалось, лінійну залежність від числа поглинаючих атомів $N_a = \rho_a N$, якщо їхня концентрація незначна.

Переходимо до обчислення асимптотики функції W_{λ_0} при великих густинах поглинаючих атомів. Інтегруватимемо в (52.7) за змінною $v = \Delta\omega/\Delta\omega_D$:

$$W_{\lambda_0} = \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda_0} \Delta\omega_D \int_{-\infty}^{\infty} (1 - e^{-\tau}) dv, \quad (52.10)$$

де

$$\tau = \frac{\chi^l(q)z}{\cos\theta} = \frac{\Lambda}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{(v-x)^2 + \alpha^2} dx \quad (52.11)$$

і тимчасово введена знерозмірена величина

$$\Lambda = \frac{z}{\cos\theta} \frac{2\pi^2 e^2 N_a}{mcV} f_{a'a} \frac{\alpha}{\pi\Delta\omega_D} \left(1 - e^{-\hbar\omega_0/T}\right). \quad (52.12)$$

Роблячи в (52.11) заміну $y = v/\sqrt{\Lambda}$, функцію τ можна записати так:

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{(y-x/\sqrt{\Lambda})^2 + (\alpha/\sqrt{\Lambda})^2} dx, \quad (52.13)$$

Перейдімо тепер у виразі (52.10) до нової змінної інтегрування y :

$$W_{\lambda_0} = \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda_0} \Delta\omega_D \sqrt{\Lambda} \int_{-\infty}^{\infty} (1 - e^{-\tau}) dy. \quad (52.14)$$

У границі $\Lambda \rightarrow \infty$ (великі густини поглинаючих атомів N_a/V) з (52.13) маємо

$$\tau_{\Lambda \rightarrow \infty} = \frac{1}{y^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \left[1 + \frac{2x}{y\sqrt{\Lambda}} \right]$$

$$\begin{aligned}
& \left. + \frac{3}{\Lambda} \left(\frac{x}{y} \right)^2 - \frac{\alpha}{\Lambda y^2} + \dots \right] dx \\
& = \frac{1}{y^2} \left[1 + \left(\frac{3}{2} - \alpha^2 \right) \frac{1}{\Lambda y^2} + \dots \right], \quad (52.15)
\end{aligned}$$

а потрібний інтеграл в (52.14) легко обчислюємо:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} (1 - e^{-\tau}) dy \underset{\Lambda \rightarrow \infty}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ 1 - e^{-\frac{1}{y^2}} e^{-\frac{1}{y^4 \Lambda} \left(\frac{3}{2} - \alpha^2 \right)} \right\} dy \\
& \underset{\Lambda \rightarrow \infty}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - e^{-1/y^2} \right) dy + \frac{1}{\Lambda} \left(\frac{3}{2} - \alpha^2 \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-1/y^2}}{y^4} dy.
\end{aligned}$$

Перший інтеграл інтегруємо частинами

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - e^{-1/y^2} \right) dy = 2 \int_0^{\infty} \left(1 - e^{-1/y^2} \right) dy = 2y \left(1 - e^{-1/y^2} \right) \Big|_0^{\infty} \\
& + 4 \int_0^{\infty} \frac{e^{-1/y^2}}{y^2} dy = (\text{заміна } t = 1/y) = 4 \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt = 2\sqrt{\pi}.
\end{aligned}$$

Другий інтеграл:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-1/y^2}}{y^4} dy = 2 \int_0^{\infty} \frac{e^{-1/y^2}}{y^4} dy \\
& = 2 \int_0^{\infty} t^2 e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.
\end{aligned}$$

Отже,

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 - e^{-\tau}) dy = 2\sqrt{\pi} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\Lambda} \left(\frac{3}{2} - \alpha^2 \right) + \dots \quad (52.16)$$

Нарешті, з (52.14) знаходимо

$$W_{\lambda_0} = \frac{\lambda_0}{\omega_0} r_{\lambda_0} \Delta\omega_D \left[2\sqrt{\pi\Lambda} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\Lambda}} \left(\frac{3}{2} - \alpha^2 \right) \right] \quad (52.17)$$

або, беручи до уваги лише ведучий член цієї асимптотики в явному вигляді з урахуванням того, що $\alpha = \gamma/2\Delta\omega_D$, маємо:

$$\frac{W_{\lambda_0}}{r_{\lambda}^0} = \lambda_0^2 \sqrt{\frac{z}{\cos\theta} \frac{e^2 N_a}{mc^3 V} f_{a'a} \gamma (1 - e^{-\hbar\omega_0/T})}. \quad (52.18)$$

Ми отримали неаналітичну “корінь-квадратну” залежність еквівалентної ширини лінії від числа поглинаючих атомів при їх високих густинах. Причому, як бачимо, крива залежності еквівалентної ширини від густини атомів виходить на цю асимптотику знизу або зверху залежно від величини параметра α . Урахування другого доданка в (52.17) може бути важливим для знаходження кількісної характеристики хімічного вмісту зоряної атмосфери з аналізу сильних ліній.

Запропонуємо просту інтерполяційну формулу залежності еквівалентної ширини спектральної лінії від густини поглинаючих атомів, яка об’єднує знайдені нами граничні випадки для слабких і сильних ліній:

$$\frac{W_{\lambda_0}}{r_{\lambda}^0 \lambda_0} = \frac{n_a^*}{\sqrt{1 + n_a^* \lambda_0 / 2\gamma_{\lambda}}}, \quad (52.19)$$

де знерозмірена густина атомів у стані $|a\rangle$

$$n_a^* = \frac{\lambda_0 z \pi e^2 N_a f_{a'a}}{mc^2 V \cos\theta} \left(1 - e^{-\hbar\omega_0/T} \right), \quad (52.20)$$

а лоренцівська ширина лінії за шкалою довжин хвиль, згідно з (13.22), дорівнює $\gamma_{\lambda} = \gamma \lambda_0^2 / 2\pi c$. Для малих значень величини n_a^* з (52.19) отримаємо вираз (52.9), а для $n_a^* \lambda_0 / 2\gamma_{\lambda} \gg 1$ виходимо на залежність (52.18). Формула (52.19) є зручною для попереднього прикидного аналізу хімічного вмісту зорі, оскільки обчислення n_a^* , за відомою з експерименту еквівалентною шириною лінії зводиться до розв’язку квадратного рівняння.

Ми знайшли поведінку еквівалентної ширини спектральної лінії для малих і великих густин поглинаючих атомів, використовуючи спрощену модель атмосфери й не беручи до уваги процесів розсіяння. Повна інформація про залежність W_{λ_0} від густини N_a/V закладена в розв'язку точного нелінійного рівняння (8.15), яке враховує також двофотонні переходи і ґрунтується на реалістичнішій моделі атмосфери зорі.

Глибини спектральних ліній інших зір, для яких неможливо вимірювати залежність інтенсивності від кута θ , обчислюємо за потоком (2.8) та виразом (51.15) для I_q :

$$\begin{aligned}
 F_\omega &= 2 \int_0^{\pi/2} \cos \theta I_q \sin \theta d\theta \\
 &= 2 \int_0^\infty dz \kappa(q) B_{\omega, \alpha}(T) \int_0^{\pi/2} e^{-\int_z^\infty \kappa(q) dz' / \cos \theta} \sin \theta d\theta.
 \end{aligned}
 \tag{52.21}$$

Заміною $x = 1/\cos \theta$ звідси отримуємо:

$$F_\omega = 2 \int_0^\infty dz \kappa(q) B_{\omega, \alpha}(T) E_2(\tau),
 \tag{52.22}$$

де інтегральна показникова функція [19]

$$E_2(\tau) = \int_1^\infty \frac{e^{-x\tau}}{x^2} dx,
 \tag{52.23}$$

а оптична глибина τ визначена формулою (51.9).

Отже, глибина лінії R_λ , згідно з означенням (2.10), дорівнює:

$$\begin{aligned}
 R_\lambda &= \frac{F_\lambda^c - F_\lambda^l}{F_\lambda^c} = \frac{1}{F_\lambda^c} \int_0^\infty B_{\omega, \alpha}(T) \kappa^c(q) \\
 &\times \left\{ E_2(\tau^c) - \left[1 + \frac{\kappa^l(q)}{\kappa^c(q)} \right] E_2(\tau) \right\} dz,
 \end{aligned}
 \tag{52.24}$$

тут

$$\tau^c = \int_z^{\infty} \kappa^c(q) dz', \quad (52.25)$$

$$\tau = \int_z^{\infty} (\kappa^c(q) + \kappa^l(q)) dz',$$

а

$$F_{\lambda}^c = \int_0^{\infty} B_{\omega, \alpha}(T) \kappa^c(q) E_2(\tau^c) dz. \quad (52.26)$$

Якщо задана модель атмосфери зорі, то рівняння (52.24), як і формула (52.1), дозволяє в загальному обчислювати глибину спектральної лінії та її еквівалентну ширину (2.12).

§ 53. Теорія моделей зоряних атмосфер

Тепер, щоб не віддалялись від проблеми оберненої задачі, яка виникає при розв'язку рівняння переносу випромінювання, обговоримо теорію моделей зоряних атмосфер. Поставимо собі за мету, згідно із задекларованим призначенням нашої книжки, дати лише основні рівняння для побудови моделі атмосфери, а не сконструювати одну з них. Основою при цьому є знову ж рівняння переносу випромінювання й такі фундаментальні фізичні принципи як закон збереження енергії та закони теплової й механічної рівноваги.

У теорії моделей зоряних атмосфер одним з головних завдань є встановлення розподілу температури вздовж глибини. Ми й надалі розглядаємо плоскопаралельну геометрію атмосфери, тобто вважаємо, що кривизна шарів атмосфери дуже мала. Уважаємо також, що атмосфера має заданий хімічний склад і перебуває у

стаціонарному стані. Іншими словами, вивчаємо атмосферу “спокійної” зорі.

Звернімось до рівняння (51.1) і підсумуймо обидві його частини за поляризаціями, приймаючи, що коефіцієнт поглинання не залежить від поляризації α і кута θ (такі тонкощі тут зайві):

$$\cos \theta \frac{dI_{\omega}(\theta)}{dz} = -\kappa_{\omega} [I_{\omega}(\theta) - B_{\omega}(T)], \quad (53.1)$$

де інтенсивність неполяризованого випромінювання

$$I_{\omega}(\theta) = \sum_{\alpha=1,2} I_q = \sum_{\alpha=1,2} I_{\mathbf{k},\alpha} \quad (53.2)$$

і відповідно функція Планка

$$\begin{aligned} B_{\omega}(T) &= \sum_{\alpha=1,2} B_{\omega,\alpha}(T) = 2B_{\omega,\alpha}(T) \\ &= \frac{2\hbar}{c^2} \left(\frac{\omega}{2\pi} \right)^3 \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}, \end{aligned} \quad (53.3)$$

а коефіцієнт поглинання

$$\kappa_{\omega} = \kappa(q). \quad (53.4)$$

Інтегруємо рівняння (53.1) за усіма частотами

$$\cos \theta \frac{dI(\theta)}{dz} = - \int_0^{\infty} d\omega \kappa_{\omega} [I_{\omega}(\theta) - B_{\omega}(T)], \quad (53.5)$$

тут залежна від кута θ повна інтенсивність

$$I(\theta) = \int_0^{\infty} I_{\omega}(\theta) d\omega. \quad (53.6)$$

Рівняння (53.5) є точним рівнянням переносу випромінювання з урахуванням однофотонних переходів. Для того щоб просунутись далі, тут ми не обійдемося без додаткових припущень і наближень.

Запровадьмо деяке усереднене за частотами значення коефіцієнта поглинання $\bar{\kappa}$, таке, що

$$\int_0^{\infty} d\omega \kappa_{\omega} [I_{\omega}(\theta) - B_{\omega}(T)] = \bar{\kappa} \int_0^{\infty} d\omega [I_{\omega}(\theta) - B_{\omega}(T)]. \quad (53.7)$$

Власне ця формула й буде рівнянням для величини $\bar{\kappa}$, з якого, врешті-решт, визначатимемо її значення. Тепер рівняння (53.5) набуває простого вигляду:

$$\cos \theta \frac{dI(\theta)}{dz} = -\bar{\kappa} [I(\theta) - B(T)], \quad (53.8)$$

де функція

$$B(T) = \int_0^{\infty} B_{\omega}(T) d\omega. \quad (53.9)$$

Рівняння (53.8) описує так звану “сіру” атмосферу, тобто атмосферу, у якій коефіцієнт поглинання $\bar{\kappa}$ не залежить від частоти. Припущення (53.7) називають наближенням сірої атмосфери.

Перш ніж іти далі, корисно мати явний вигляд $B(T)$, який легко знаходимо, використавши функцію Планка (53.3):

$$\begin{aligned} B(T) &= \frac{2\hbar}{c^2(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \\ &= \frac{2\hbar}{c^2(2\pi)^3} \left(\frac{T}{\hbar}\right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \end{aligned}$$

Цей інтеграл дорівнює $\pi^4/15$, і ми отримуємо, що інтегральна інтенсивність $B(T)$ пропорційна до четвертого степеня темпера-

тури (закон Стефана–Больцмана)⁶:

$$B(T) = \frac{\pi}{60c^2\hbar^3} T^4. \quad (53.10)$$

Скориставшись означенням (51.9), для оптичної глибини введемо

$$\tau = \int_z^\infty \bar{\kappa} dz' \quad (53.11)$$

і запишімо рівняння (53.8) так:

$$\cos\theta \frac{dI(\theta)}{d\tau} = I(\theta) - B(T), \quad (53.12)$$

інтенсивності $I(\theta)$, $B(T)$ є функціями τ або координати z згідно з (53.11). Оскільки немає випромінювання, яке падає ззовні на поверхню зорі, то при $\tau = 0$ величина $I(\theta) = 0$, якщо $\cos\theta < 0$.

На розв'язок цього рівняння різними методами було витрачено багато зусиль, починаючи з піонерських праць К. Шварцшільда, А. Шустера та А. Еддінгтона. Розв'язок рівняння і знаходження інтенсивності прийнято називати проблемою Мілна.

Знайдемо наближений розв'язок рівняння (53.12) і одночасно встановимо залежність температури T від оптичної глибини τ . З цією метою проінтегруймо обидві частини цього рівняння за всіма кутами, скориставшись означенням потоку (2.7) і вводячи повний потік

$$\pi F = \int_0^\infty d\omega \pi F_\omega = \int_0^\infty d\omega \sum_{\alpha=1,2} \int d\Omega I_{\mathbf{k},\alpha} \cos\theta$$

⁶Цей закон експериментально встановив у 1879 році австрійський фізик Йозеф Стефан (1835–1893), теоретичне доведення в 1884 році зробив австрійський фізик, учень Стефана Людвіг Больцман (1844–1906). Г. Лоренц у своїй промові, присвяченій пам'яті Л. Больцмана, назвав це доведення справжньою перлиною теоретичної фізики.

$$\begin{aligned}
&= \int_0^{\infty} d\omega \int d\Omega \cos \theta I_{\omega}(\theta) = \int d\Omega \cos \theta I(\theta) \\
&= 2\pi \int_0^{\pi} I(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta.
\end{aligned} \tag{53.13}$$

Отже, маємо

$$\frac{1}{4} \frac{dF}{d\tau} = J - B(T), \tag{53.14}$$

де середня інтегральна інтенсивність

$$J = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega I(\theta)$$

збігається з означенням (2.4), яке ми ввели раніше.

Скористайтесь тепер законом збереження енергії. Якщо транспорт енергії відбувається лише шляхом випромінювання (внаслідок того, що теплопровідність атмосфери дуже мала й конвекція також незначна), то у стані променевої рівноваги інтегральний потік енергії πF не повинен залежити від глибини τ , $F = \text{const}$. Тому ліва частина рівняння (53.14) дорівнює нулеві, і отже, знаходимо, що середня інтегральна інтенсивність

$$J = B(T),$$

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega I(\theta) = B(T) \tag{53.15}$$

для всіх значень оптичної глибини τ або для довільної координати z , яка зв'язана з τ рівнянням (53.11).

Почнімо, нарешті, розв'язувати рівняння (53.12). Природно скористатись розкладом величини $I(\theta)$ в ряд за поліномами Лежандра [8, 19, 28]

$$\begin{aligned}
P_l(\cos \theta) &= \frac{(-)^l}{2^l l!} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^l \sin^{2l} \theta, \\
l &= 0, 1, 2, \dots;
\end{aligned} \tag{53.16}$$

$$P_0(\cos \theta) = 1, \quad P_1(\cos \theta) = \cos \theta,$$

$$P_2(\cos \theta) = \frac{3}{2} \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{3} \right),$$

$$P_3(\cos \theta) = \frac{5}{2} \left(\cos^3 \theta - \frac{3}{5} \cos \theta \right).$$

Отже, маємо розклад:

$$I(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_l P_l(\cos \theta), \quad (53.17)$$

множник $(2l+1)$ біля коефіцієнтів розкладу виділено для зручності. Підставляємо цей розклад у рівняння (53.12), скористаємось тим, що

$$P_l(\cos \theta) \cos \theta = \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(\cos \theta) + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1}(\cos \theta), \quad (53.18)$$

і в результаті знайдемо:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} \frac{dI_l}{d\tau} l P_{l-1}(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{dI_l}{d\tau} (l+1) P_{l+1}(\cos \theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_l P_l(\cos \theta) - B(T). \end{aligned}$$

У першому члені лівої частини цього рівняння робимо заміну $(l-1) = l'$, а в другому — $(l+1) = l'$ і, знявши штрихи та беручи до уваги ортогональність функцій $P_l(\cos \theta)$, прирівняємо зліва і справа коефіцієнти при поліномах Лежандра з однаковими значеннями l :

$$\frac{dI_1}{d\tau} = I_0 - B(T),$$

$$(l+1)\frac{dI_{l+1}}{d\tau} + l\frac{dI_{l-1}}{d\tau} = (2l+1)I_l, \quad (53.19)$$

$$l = 1, 2, 3, \dots$$

Причому розв'язки цієї системи рівнянь повинні задовольняти умову: при $\tau = 0$ інтенсивність $I(\theta) = 0$ для $\cos \theta < 0$.

Обчислимо декілька перших моментів інтенсивності (53.17) з $\cos \theta$, використавши умову ортогональності поліномів Лежандра [8, 19, 28]:

$$\int_0^\pi P_{l'}(\cos \theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = 0, \quad l \neq l',$$

$$\int_0^\pi P_l^2(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1}. \quad (53.20)$$

Нульовий момент (53.15)

$$\begin{aligned} B(T) &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} I(\theta) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_l P_l(\cos \theta) d\theta \\ &= \frac{1}{2} I_0 \int_0^\pi \sin \theta d\theta = I_0. \end{aligned} \quad (53.21)$$

Перший момент (53.13)

$$\begin{aligned} \frac{F}{4} &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} I(\theta) \cos \theta \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_l \int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_1(\cos \theta) \sin \theta d\theta \\ &= \frac{3}{2} I_1 \int_0^\pi P_1^2(\cos \theta) \sin \theta d\theta = I_1. \end{aligned} \quad (53.22)$$

Другий момент⁷

$$\begin{aligned}
 K &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} I(\theta) \cos^2 \theta = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left(\frac{2}{3} P_2(\cos \theta) + \frac{1}{3} \right) I(\theta) \\
 &= \frac{1}{3} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_l \int_0^{\pi} P_2(\cos \theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (53.23) \\
 &+ \frac{1}{6} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_l \int_0^{\pi} P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{3} I_2 + \frac{1}{3} I_0.
 \end{aligned}$$

Підставляючи коефіцієнт I_0 з (53.21) у перше рівняння системи (53.19), отримуємо, що $I_1 = \text{const}$. Це очевидно також і з (53.22). Справді, оскільки $I_1 = F/4$, а повний потік F для будь-якого τ — величина стала, то й коефіцієнт I_1 є сталим.

Наступне рівняння з (53.19) при $l = 1$ таке:

$$2 \frac{dI_2}{d\tau} + \frac{dI_0}{d\tau} = 3I_1. \quad (53.24)$$

Інтегруємо його й отримуємо

$$2I_2 + I_0 = 3I_1\tau + C, \quad (53.25)$$

де C — константа інтегрування.

Далі при $l = 2$ з (53.19) маємо

$$3 \frac{dI_3}{d\tau} = 5I_2. \quad (53.26)$$

З фізичних міркувань випливає, що $I_2 \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \infty$. Це видно з того, що зі збільшенням глибини τ інтенсивність $I(\theta)$ повинна наближатись до ізотропного випромінювання абсолютно чорного тіла $B(T)$, і тому другий момент

$$K = \int \frac{d\Omega}{4\pi} I(\theta) \cos^2 \theta \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} B(T) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cos^2 \theta = \frac{B(T)}{3}.$$

⁷Ми використовуємо для моментів загальноприйняті позначення, які ввів Е. Еддінгтон.

А з (53.23) маємо

$$I_2 = \frac{3}{2}K - \frac{1}{2}B(T),$$

і отже, $I_2 \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \infty$. Припустимо, що $I_2 \sim e^{-\beta\tau}$, $\beta > 0$, решта величин I_l з $l \geq 3$ також прямують до нуля, коли $\tau \rightarrow \infty$, як це впливає з рівнянь (53.19).

Отже, рівняння (53.26), як і наступні з системи (53.19), для $l > 3$ задовольняємо підстановкою

$$I_l = A_l e^{-\beta\tau}, \quad l \geq 2, \quad (53.27)$$

A_l, β — сталі величини. Причому з рівняння (53.26) впливає, що

$$A_3 = -\frac{5}{3\beta}A_2, \quad (53.28)$$

а з (53.19) при $l \geq 3$ для решти сталих A_l маємо рекурентне співвідношення, яке зв'язує їх з A_2 :

$$-\beta(l+1)A_{l+1} - \beta l A_{l-1} = (2l+1)A_l, \quad l \geq 3. \quad (53.29)$$

Величини A_l повинні забезпечити для $I(\theta)$ з (53.17) ще й додаткову умову: $I(\theta) = 0$ для $\cos \theta < 0$ при $\tau = 0^8$.

Збираючи разом необхідні вирази, запишімо розв'язок (53.17) у явному вигляді

$$I(\theta) = B(T) + \frac{3}{4}F \cos \theta + e^{-\beta\tau} \sum_{l \geq 2} (2l+1)A_l P_l(\cos \theta). \quad (53.30)$$

Одночасно формула (53.25), яку, зважаючи на (53.21), (53.22) та (53.27), запишемо у вигляді

$$B(T) = \frac{3}{4}F\tau + C - 2A_2 e^{-\beta\tau}, \quad (53.31)$$

⁸Один з можливих розв'язків рекурентних рівнянь (53.29) є таким: $A_l = (-)^l A$, $A = \text{const}$, $\beta = 1$. Однак рівняння (53.12) вимагає, щоб $A = 0$. Цікаво також, що рівняння (53.12) має точний розв'язок: $I(\theta) = c_1 + c_2(\tau + \cos \theta) + c_3 e^{-\beta\tau} / (1 + \beta \cos \theta)$, $B(T) = c_1 + c_2\tau + c_3 e^{-\tau}$, c_1, c_2, c_3 — сталі; але узгодження цих формул, відповідно до означення (53.15), вимагає, щоб $\beta = 0$.

дає з урахуванням (53.10) шуканий розподіл температури залежно від глибини.

Якщо в розкладі (53.30) обмежитись лише двома першими доданками, тобто покласти $A_2 = 0$, $A_3 = 0, \dots$, то

$$I(\theta) = B(T) + \frac{3}{4}F \cos \theta, \quad (53.32)$$

$$B(T) = \frac{3}{4}F\tau + C. \quad (53.33)$$

Сталу інтегрування C знайдемо з умови, що на поверхні атмосфери, коли $\tau = 0$, температура $T = T_0$:

$$B(T) = \frac{3}{4}F\tau + B(T_0), \quad C = B(T_0). \quad (53.34)$$

Нарешті знайдемо сталу F . Зрозуміло, що нашим наближенням розв'язком (53.32) ми не зможемо задовольнити умову $I(\theta) = 0$ при $\tau = 0$, якщо $\cos \theta < 0$, тому накладаємо слабшу умову. Скористаємось тим, що потік випромінювання, який падає на поверхню атмосфери, дорівнює нулеві:

$$2\pi \int_{\pi}^{\pi/2} I(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta = 0, \quad \tau = 0. \quad (53.35)$$

Використовуючи (53.32), звідси маємо

$$\int_{\pi}^{\pi/2} \cos \theta \left[B(T_0) + \frac{3}{4}F \cos \theta \right] \sin \theta d\theta = 0$$

або, інтегруючи, одержуємо

$$F = 2B(T_0). \quad (53.36)$$

Остаточно з (53.32) та (53.34) знаходимо

$$I(\theta) = B(T_0) \left(\frac{3}{2}\tau + 1 + \frac{3}{2} \cos \theta \right),$$

$$B(T) = \frac{3}{2}B(T_0) \left(\tau + \frac{2}{3} \right), \quad (53.37)$$

а з урахуванням (53.10) маємо розподіл температури в зоряній атмосфері

$$T^4 = T_0^4 \left(1 + \frac{3}{2} \tau \right). \quad (53.38)$$

З (53.37) для $\tau = 0$ отримуємо закон потемніння від центра до краю диска зорі:

$$\frac{I(\theta)}{I(0)} = \frac{2}{5} \left(1 + \frac{3}{2} \cos \theta \right). \quad (53.39)$$

Неважко знайти наступне наближення для інтенсивності $I(\theta)$, коли $A_2 \neq 0$, а розподіл температури задається законом (53.31). Ми не будемо цим займатись, зважаючи на невелику цінність моделі сірої атмосфери для інтерпретації зоряних спектрів, а також на те, що точний розв'язок рівняння (53.12) (див., наприклад, [5]) практично збігається з цим головним наближенням⁹.

Отже, рівняння (53.38) разом з означенням оптичної глибини τ формулою (53.11), у яке входить усереднений коефіцієнт поглинання $\bar{\kappa}$, визначає залежність температури в зоряній атмосфері від координати z . Усереднений коефіцієнт $\bar{\kappa}$ можна шукати спочатку з простішої умови, ніж (53.7), уважаючи, що вона виконується для кожного доданка. Зокрема, можна прийняти таке означення:

$$\bar{\kappa} = \int_0^{\infty} \kappa_{\omega} B_{\omega}(T) d\omega \Big/ \int_0^{\infty} B_{\omega}(T) d\omega. \quad (53.40)$$

Іншими словами, величина $\bar{\kappa}$ дорівнює середньому значенню коефіцієнта поглинання за розподілом Планка.

Таким чином, рівняння (53.11), (53.38), (53.40) зв'язують між собою температуру T і густину частинок в атмосфері для кожного τ або координати z .

⁹Точний розв'язок проблеми Мілна незначно відрізняється від розглянутого наближення: наприклад, у (53.37) в круглих дужках замість $2/3$ маємо монотонно зростаючу функцію від $1/\sqrt{3} = 0.577350$ при $\tau = 0$ до 0.710446 при $\tau = \infty$.

Для того щоб знайти залежність температури й густини частинок лише від координати z , необхідне додаткове рівняння. Переходимо до встановлення ще одного фундаментального рівняння в теорії моделей зоряних атмосфер. Використаймо для цього умову механічної рівноваги, беручи до уваги статичний випадок. Іншими словами, говоритимемо про гідростатичну рівновагу, яка досягається дією на речовину атмосфери, з одного боку, сили тяжіння, направленої до центра зорі, а з другого — зрівноважувальних сил газового тиску та тиску випромінювання.

Розгляньмо елементарний об'єм плоскопаралельної атмосфери $\Delta V = \Delta s \Delta z$, який опирається на площадку Δs . Він має вагу $\rho g \Delta s \Delta z$, де ρ — густина речовини атмосфери, що дорівнює кількості маси на одиницю об'єму, g — прискорення сили тяжіння. Ця вага зрівноважується силою, що створюється різницею тисків із двох боків елементарного об'єму, помноженою на елементарну площадку Δs . Отже, рівняння рівноваги таке:

$$\rho g \Delta s \Delta z = -\Delta P \Delta s,$$

знак “мінус” ураховує, що тиск збільшується зі зменшенням z . Запишімо це рівняння в диференціальній формі:

$$-\frac{dP}{dz} = \rho g. \quad (53.41)$$

Тиск P складається із суми газового тиску P_1 , для якого можна використовувати рівняння стану ідеального газу

$$P_1 = T \sum_{c \geq 1} \frac{N_c}{V}, \quad (53.42)$$

N_c — кількість частинок сорту c , та тиску випромінювання [15]

$$P_2 = \frac{4}{3} \frac{\sigma}{c} T^4, \quad (53.43)$$

де стала Стефана–Больцмана

$$\sigma = \frac{\pi^2}{60c^2 \hbar^3}. \quad (53.44)$$

Отже,

$$P = P_1 + P_2, \quad (53.45)$$

але, як правило, $P_2 \ll P_1$ (наприклад, для Сонця), і тому беруть до уваги лише газовий тиск.

Густина

$$\rho = \sum_{c \geq 1} \frac{N_c}{V} m_c, \quad (53.46)$$

де m_c — маса частинок сорту c , з яких складається зоряна атмосфера. Як уже неодноразово підкреслювалось, атмосфера зорі містить, в основному, водень та його йони (водню $\sim 90\%$ і гелію $\sim 10\%$ хімічного складу атмосфери).

Рівняння (53.41) можна переписати через усереднений коефіцієнт поглинання та оптичну глибину:

$$\frac{dP}{d\tau} = \frac{\rho g}{\bar{\kappa}}. \quad (53.47)$$

Таким чином, система двох рівнянь для температури (53.38) і для тиску (53.47) та формул, що обслуговують їх, розв'язують проблему вибору моделі атмосфери в наближенні “сірої” атмосфери. Зрозуміло, що це лише нульове наближення, лише перший крок виходу із зачарованого кола оберненої задачі. Після встановлення цієї нульової моделі можна переходити до подальшого її узгодження зі спостережуваними величинами вже з урахуванням частотної залежності коефіцієнта поглинання. Якщо між обчисленими і спостережуваними спектрами досягнуто достатньо доброго узгодження, то говорять, що модель представляє (репрезентує) зорю¹⁰. Для Сонця модель атмосфери можна піддавати детальній перевірці, оскільки для нього добре відомі прискорення

¹⁰Процес творення будь-якої моделі є подвоєнням реальності. Образотворче мистецтво також подвоює реальність, як і звичайне дзеркало. Дзеркало творить інший Світ, який фізики намагаються зрозуміти через протилежнознакові заряди, спіни, імпульси, інші квантові числа частинок мікросвіту (так звана теорема про *CPT*-інваріантність). Пізнання навколишності чи до-

сили тяжіння, величина потоку енергії, поверхнева температура та велика кількість інформації, що вилучають зі спостережень і вимірювань неперервного та лінійчастого спектра.

§ 54. Хімічний аналіз зоряних атмосфер

Атмосфера зорі майже стовідсотково складається з водню та гелію, решти хімічних елементів на декілька порядків менше. Однак спектральні лінії атомів саме цих елементів дають значну інформацію і про будову атмосфери, і про фізичні процеси, які відбуваються в ній. Отже, визначення хімічного вмісту елементів у зоряних атмосферах — одна з важливих задач дослідження атмосфери.

Раніше ми вже торкалися питання про визначення кількості атомів в одиниці об'єму за характером їхніх спектральних ліній. Першим кроком може бути прикидне встановлення об'ємної густини атомів у стані $|a\rangle$ за глибиною лінії або еквівалентною шириною. Наступним кроком, що уточнює отримане значення N_a/V , є узгодження шляхом підганяння густини атомів теоретично розрахованого контуру спектральної лінії до його спостережуваних значень.

Почнімо з аналізу слабких ліній ($r_\lambda \sim 0.10 \div 0.15$), коли можна використати лінійну ділянку кривої росту (52.9). Для виключення товщини обертаючого шару z з цього рівняння можна скористатись тим, що актуальними товщинами є ті, які задовольняють умову:

$$\frac{z \kappa^c(q)}{\cos \theta} \simeq 1. \quad (54.1)$$

рогою мистецтва, що робить художник, чи через математичні формули, що робить учений, чи через віру завжди йде шляхом подвоєння Світу та “припасовування” образу або моделі до того, що ми відчуваємо, і важко сказати з певністю, що з них первинне. Пригадаємо, що легендарний Персей відтяв голову Медузі Горгоні, користуючись мідним щитом як дзеркалом, щоб уникнути її погляду, який перетворював усе живе в камінь. Наведемо ще, може, дивну, але й цікаву думку французького письменника Леона Блуа (1846–1917) з його “Гірського Старця” (1909): “Радощі цього світу можуть виявитись пекельними муками, побаченими в дзеркалі перевернутими”.

Просто нижні шари атмосфери вже не даватимуть суттєвого внеску в інтенсивність I_q . У результаті з (52.9) знаходимо:

$$W_{\lambda_0} = \lambda_0^2 \frac{\pi e^2}{mc^2 \kappa(q)} \frac{N_a}{V} f_{a'a}. \quad (54.2)$$

Сталу r_λ^0 і послаблювальний фактор на вимушене випромінювання з (52.9), величина яких є порядку одиниці, як і стала пропорційності в (54.1), ми об'єднали в один множник і, враховуючи оцінний характер наших розрахунків, прирівняли його до одиниці.

Якщо ми звернемося до еквівалентної ширини спектральної лінії (2.12), яка визначається за потоком (2.8), то потрібно буде проаналізувати вираз (52.24). Легко бачити, що для слабких ліній, коли можливий розклад за $\kappa^l(q)$, контур глибини лінії повторює контур коефіцієнта поглинання в лінії: $R_\lambda \sim \kappa^l(q)$. Далі, інтегруючи за частотами в межах лінії аналогічно до (52.8), ми знову прийдемо до формули (54.2).

Розглянемо лінії, які виникають при переході з деякого збудженого стану $|a\rangle$. Будемо відраховувати енергію від енергії основного стану E_0 . Уведемо означення потенціалу збудження

$$\chi_a = E_a - E_0, \quad (54.3)$$

очевидно, що $\chi_a > 0$. Різницю між початком неперервного спектра й енергією основного стану називають енергією йонізації. Під N_a в (54.2) розуміємо кількість атомів у стані з енергією E_a , і отже, потрібно брати до уваги явище виродження¹¹. Тому величина (4.8) тут дорівнює:

$$\rho_a = \frac{g_a e^{-E_a/T}}{\sum_a g_a e^{-E_a/T}}, \quad (54.4)$$

де g_a — кратність виродження енергетичного рівня, тобто кількість станів з енергією E_a , називають також статистичною вагою

¹¹ Див. зауваження після формули (13.3).

рівня; тут квантове число a нумерує вже не стани, а рівні. Запишемо цей вираз через потенціал збудження (54.3) і для $N_a = N \rho_a$ знайдемо

$$N_a = N g_a \frac{e^{-\chi_a/T}}{u(T)}, \quad (54.5)$$

де атомна сума станів

$$u(T) = \sum_a g_a e^{-\chi_a/T}, \quad (54.6)$$

а N — це повна кількість атомів деякого хімічного елемента в атмосфері, спектральні лінії якого вивчаємо.

Тепер, підставляючи (54.5) у формулу (54.2), знаходимо вираз для еквівалентної ширини спектральної лінії в такому вигляді:

$$W_{\lambda_0} = \lambda_0^2 \frac{\pi e^2}{m c^2 \varkappa^c(q)} \frac{N g_a f_{a'a}}{V u(T)} e^{-\chi_a/T}. \quad (54.7)$$

Криву зростання зручно будувати за логарифмічною шкалою. Знерозмірюючи еквівалентну ширину довжиною хвилі λ_0 , логарифмуємо вираз (54.7):

$$\ln \left(\frac{W_{\lambda_0}}{\lambda_0} \right) = \ln (\lambda_0 g_a f_{a'a}) - \frac{\chi_a}{T} + \ln \left(\frac{\pi e^2}{m c^2 \varkappa^c(q) u(T)} \frac{N}{V} \right). \quad (54.8)$$

Нас не повинно турбувати те, що у правій частині цього рівняння під знаком логарифма маємо розмірні величини, якщо є домовленість вимірювати в тих самих одиницях довжини (наприклад, в анґстремах) довжину хвилі λ_0 , класичний радіус електрона e^2/mc^2 й обернену величину коефіцієнта поглинання в неперервному спектрі $1/\varkappa^c(q)$. Якщо тепер побудувати функцію $y = \ln (W_{\lambda_0}/\lambda_0)$ від змінної $x = \ln (\lambda_0 g_a f_{a'a})$, то отримаємо пряму з нахилом в 45° , яка відсікає на осі ординат значення

$$y_0 = \ln \left(\frac{\pi e^2}{m c^2 \varkappa^c(q) u(T)} \frac{N}{V} \right) - \frac{\chi_a}{T}. \quad (54.9)$$

Отже, вимірюючи еквівалентні ширини серії слабких ліній атомів конкретного хімічного елемента для заданого потенціалу збудження χ_a , ми повинні отримати точки, що лягають на пряму. Розглядаючи серії ліній з різними потенціалами збудження, отримуємо низку паралельних прямих. За відомим значенням y_0 знаходимо абсолютний хімічний вміст елемента, тобто кількість атомів в одиниці об'єму N/V , оскільки всі решта величини в (54.9) відомі.

Велику допомогу при конкретних числових розрахунках можна отримати з довідника [30], у якому компактно й повно зібрано числові значення різних фізичних величин, які використовують в астрофізиці. Слід, однак, пам'ятати, що прийняті значення астрофізичних величин щороку змінюються, і коли мова йде про прецизійні обчислення, необхідно використовувати найновіші дані з журнальних статей.

Не будемо зупинятись докладніше на цьому аналізі, а лише зауважимо таке. На цьому так званому методі кривої зростання визначення хімічного вмісту елементів у зоряних атмосферах ґрунтуються численні дослідження. Зусилля багатьох дослідників зосереджені на його вдосконаленні шляхом різних наближених виразів для глибини та еквівалентних ширин спектральних ліній з ґрунтовним аналізом неточностей, пов'язаних із різного роду ненадійностями в чисельних значеннях сталої загасання, сил осциляторів, мікротурбулентних швидкостей¹².

Сучасні комп'ютерні можливості провадження обчислень дозволяють працювати не лише з еквівалентними ширинами, а з надійно виміряними контурами спектральних ліній і порівнювати їх зі знайденими з розв'язку точного рівняння переносу випромінювання (8.15). Маючи "в руках" такі вільні параметри, як, наприклад, швидкість мікротурбулентних рухів речовини атмос-

¹²Мистецтво інтерпретації спостережень на основі теоретичних розрахунків вимагає "набитої руки". Автор зі щирим подивом не раз спостерігав, з якою легкістю і сміливістю експериментатори "кидаються" тонкими, з погляду фізика-теоретика, величинами й поняттями, які він делікатно й обережно вилучає з формул. Але, мабуть, саме ця "фамільярність" у стосунках із цими фізичними величинами і веде експериментаторів до успіху.

фери зорі, можна прецизійніше визначати абсолютні значення її хімічного вмісту, а також ступінь відхилення від локальної термодинамічної рівноваги.

§ 55. Вплив обертання та пульсації зір на спектральні лінії

При аналізі зоряних атмосфер одним із завдань дослідника є вивчення впливу обертання зорі на спектр її випромінювання. Було б дивним бачити зорю, що не обертається, тобто момент імпульсу якої дорівнював би нулеві. Фізичні механізми їх походження та закон збереження моменту імпульсу вимагають, щоб зорі обертались. Величину кутової швидкості обертання зорі можна визначити, досліджуючи зміну профілів атомних спектральних ліній.

Розширення спектральних ліній через обертання зір зумовлене різними за величиною і знаком доплерівськими зміщеннями частот випромінювання, яке йде до спостерігача з різних точок поверхні зорі, оскільки вони (ці точки) мають різні проекції лінійної швидкості на промінь зору.

Виберімо систему координат, пов'язану з зорею так, щоб вісь z була напрямлена на спостерігача (див. рис. 20), а вектор кутової швидкості зорі Ω лежав у площині $x = 0$ під кутом θ до напрямку зору z . Уведемо одиничні вектори $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ уздовж осей x, y, z . Отже, вектор

$$\Omega = \mathbf{e}_y \Omega \sin \theta + \mathbf{e}_z \Omega \cos \theta.$$

Лінійна швидкість елемента поверхні зорі в точці \mathbf{r} дорівнює, за означенням, векторному добуткові:

$$\mathbf{v} = [\Omega \mathbf{r}] = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \Omega_x & \Omega_y & \Omega_z \\ x & y & z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ 0 & \Omega \sin \theta & \Omega \cos \theta \\ x & y & z \end{vmatrix} \quad (55.1)$$

або

$$\mathbf{v} = \mathbf{e}_x \Omega (z \sin \theta - y \cos \theta) + \mathbf{e}_y \Omega x \cos \theta - \mathbf{e}_z \Omega x \sin \theta. \quad (55.2)$$

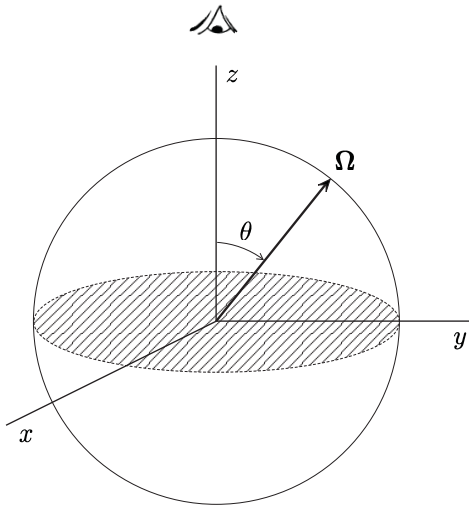


Рис. 20. Система координат пов'язана із зорею, що обертається з кутковою швидкістю Ω .

Отже, проекція на промінь зору лінійної швидкості атома, що випромінює

$$v_z = -\Omega x \sin \theta,$$

відповідно доплерівський зсув частоти

$$\frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} = \frac{v_z}{c},$$

а спостережувана частота

$$\omega = \omega_0 - \frac{\omega_0 \Omega}{c} x \sin \theta, \quad (55.3)$$

де ω_0 — частота випромінювання нерухомого атома.

Якщо інтенсивність випромінювання з нерухомої зорі дорівнює $I_{\mathbf{k},\alpha}$, то для зорі, що обертається, спостережувана інтенсивність є величиною, усередненою по всій видимій для спостерігача поверхні зорі, тобто по всьому диску. Це усереднення ми позначимо

чаємо гострими кутовими дужками¹³:

$$\langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle = \frac{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy I_{\mathbf{k},\alpha} \Big|_{\omega_0 \rightarrow \omega_0(1-\Omega x \sin \theta/c)}}{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy}, \quad (55.4)$$

де R — радіус зорі. Очевидно, що двократний інтеграл у знаменнику цього виразу дорівнює площі видимого диска πR^2 .

Якщо не враховувати залежності інтенсивності $I_{\mathbf{k},\alpha}$ від координат, тобто якщо не враховувати так зване потемніння до краю диска зорі, то це усереднення можна виконати в загальному випадку. Насамперед беремо до уваги те, що інтенсивність лінії $I_{\mathbf{k},\alpha}$ як функція частоти є фактично функцією різниці частот:

$$I_{\mathbf{k},\alpha} = I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega_0), \quad (55.5)$$

де ω_0 — резонансна частота лінії. При розрахунку розширення спектральної лінії різними механізмами головний внесок дає зміщення резонансної частоти ω_0 саме в цій різниці, а не у сталій загасання γ , не в доплерівському зсуві частоти $\Delta\omega_D$ чи в інших множниках, які з точністю до величин зникаючої мализни можна в межах лінії вважати сталими. Тому вираз (55.4) запишемо так:

$$\langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle = \frac{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega_0(1 - \Omega x \sin \theta/c))}{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy} \quad (55.6)$$

$$= \frac{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega') \delta[\omega' - \omega_0(1 - \Omega x \sin \theta/c)]}{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy}$$

¹³Таке позначення ми використовували в § 14 при описі впливу макротурбулентних рухів в атмосфері зорі на контури спектральних ліній.

або

$$\sphericalangle I_{\mathbf{k},\alpha} \sphericalangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathbf{k},\alpha}(\omega - \omega') P(\omega') d\omega', \quad (55.7)$$

де функція

$$P(\omega) = \frac{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy \delta \left[\omega - \omega_0 (1 - \Omega x \sin \theta / c) \right]}{\int \int_{x^2+y^2 \leq R^2} dx dy} \quad (55.8)$$

є профілем, у який обертання зорі перетворює контур безмежно вузької спектральної лінії. Отже, спостережуваний контур (55.7) є звичайною згорткою характеристичної для цього механізму розширення функції $P(\omega)$ з контуром, що не враховує обертання.

Перейдімо до обчислення спектральної функції $P(\omega)$. Дельта-функція в (55.8) дозволяє елементарно виконати інтегрування за x :

$$P(\omega) = \frac{1}{\pi R^2} \frac{c}{\omega_0 \Omega \sin \theta} \int_{\left[\frac{(\omega - \omega_0)c}{\omega_0 \Omega \sin \theta} \right]^2 + y^2 \leq R^2} dy. \quad (55.9)$$

Тут ми використали таку властивість дельта-функції: $\delta(a + bx) = \delta[b(a/b + x)] = (1/b)\delta(x + a/b)$, a, b — сталі.

З умови, що накладена в інтегралі на y , випливають межі інтегрування: $-y_0 \leq y \leq y_0$,

$$y_0 = R \sqrt{1 - \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_R} \right)^2}, \quad (55.10)$$

де характерний для обертання масштаб доплерівського зсуву частоти

$$\omega_R = \frac{R\omega_0\Omega}{c} \sin \theta. \quad (55.11)$$

Отже, інтеграл за y у (55.9) дорівнює $2y_0$. Крім того, із цих же умов у (55.9) випливає, що вони перестають виконуватись, якщо частота така, що

$$\left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_R}\right)^2 > 1,$$

а отже, й інтеграл за y дорівнює нулеві.

Ураховуюче сказане, остаточно знаходимо спектральну функцію:

$$P(\omega) = \begin{cases} \frac{2}{\pi\omega_R} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_R}\right)^2}, & \text{в інтервалі частот} \\ \omega_0 - \omega_R \leq \omega \leq \omega_0 + \omega_R, \\ 0, & \text{поза цим інтервалом.} \end{cases}$$

Зрозуміло, що, як і вихідний дельтаподібний контур, наша спектральна функція нормована на одиницю:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega &= \int_{\omega_0 - \omega_R}^{\omega_0 + \omega_R} \frac{2}{\pi\omega_R} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_R}\right)^2} d\omega \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - x^2} dx = 1. \end{aligned} \quad (55.12)$$

Якщо відомі контури спектральних ліній $I_{k,\alpha}$ не спотворені обертанням, то згортаючи їх, згідно з (55.7), з функцією $P(\omega)$, взятою з тими значеннями ω_R , що дають якнайкраще узгодження зі спостережуваними профілями ліній, отримуємо інформацію про швидкість обертання зорі $v = R\Omega \sin \theta$.

Перейдімо до вивчення механізму впливу радіальних рухів атмосфери зорі на контури спектральних ліній атомів. Якщо зоря розширюється або стискається, то, внаслідок ефекту Доплера, частота випромінювання ω , яку вимірює спостерігач, зміщена

порівняно із частотою випромінювання ω_0 атома в нерухомій атмосфері:

$$\frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} = \pm \frac{v_z}{c}, \quad (55.13)$$

де v_z — z -компонента радіальної швидкості \mathbf{v} точки в зоряній атмосфері, тобто проекція швидкості на промінь зору, уздовж якого ми вибрали вісь z , так що

$$v_z = v \cos \theta,$$

θ — кут між радіальним напрямком і напрямком на спостерігача. Знаки “плюс” і “мінус” у формулі (55.13) відповідають розширенню і стисканню зорі.

Отже, до спостерігача потрапляє випромінювання із частотою

$$\omega = \omega_0 \pm \omega_0 \frac{v}{c} \cos \theta \quad (55.14)$$

та інтенсивністю $I_{\mathbf{k},\alpha}$, спроектованою на промінь зору, тобто помноженою на $\cos \theta$ і усередненою за всіма кутами видимої для спостерігача поверхні зорі:

$$\langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle = \frac{\frac{1}{2} \int d\Omega \cos \theta I_{\mathbf{k},\alpha} \Big|_{\omega_0 \rightarrow \omega_0 \pm \omega_0 v \cos \theta / c}}{\frac{1}{2} \int d\Omega \cos \theta}. \quad (55.15)$$

Після інтегрування за азимутальним кутом φ маємо

$$\begin{aligned} \langle I_{\mathbf{k},\alpha} \rangle &= \frac{\int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta I_{\mathbf{k},\alpha} \Big|_{\omega_0 \rightarrow \omega_0 \pm \omega_0 v \cos \theta / c}}{\int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta} \\ &= 2 \int_0^1 dx x I_{\mathbf{k},\alpha} \Big|_{\omega_0 \rightarrow \omega_0 (1 \pm vx/c)}, \end{aligned} \quad (55.16)$$

де $x = \cos \theta$.

Якщо скористатись тими ж перетвореннями, що й у випадку обертання зорі (перехід від (55.4) до (55.7)), то спостережувану інтенсивність отримаємо у вигляді згортки (55.7) зі спектральною функцією розподілу інтенсивності для розширення або стискання її атмосфери

$$P(\omega) = 2 \int_0^1 x \delta \left[\omega - \omega_0 \left(1 \pm \frac{v}{c} x \right) \right] dx. \quad (55.17)$$

Пам'ятаємо, що цей інтеграл не дорівнює нулеві за умови, що інтервал інтегрування бодай “зачіпає” точку, коли аргумент дельта-функції дорівнює нулеві. У нашому випадку з умовою, що $0 \leq x = \cos \theta \leq 1$, з (55.17) знаходимо:

$$P(\omega) = \begin{cases} \frac{2}{\omega_0} \left(\frac{c}{v} \right)^2 \left| \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \right|, & 0 \leq \left| \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \right| \leq \frac{v}{c}, \\ 0, & \text{поза цим інтервалом.} \end{cases} \quad (55.18)$$

Легко переконатись, що функція $P(\omega)$ нормована на одиницю:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega = 2 \left(\frac{c}{v} \right)^2 \int_0^{v/c} y dy = 1, \quad (55.19)$$

де $y = |\omega - \omega_0|/\omega_0$.

Спостережувана інтенсивність $\prec I_{\mathbf{k},\alpha} \succ$ для пульсуючої зорі задається, як і при обертанні, згорткою (55.7) з функцією $P(\omega)$ з формули (55.18). У зв'язку з цим використаємо з § 14 висновки щодо впливу макротурбулентних рухів на контури спектральних ліній та на їх еквівалентну ширину і сформулюймо таке твердження: оскільки $\prec I_{\mathbf{k},\alpha} \succ$ зображається у вигляді згортки, то обертання й пульсації зорі не змінюють еквівалентних ширин спектральних ліній.

РОЗДІЛ ІХ

ЗАСЕЛЕНОСТІ АТОМНИХ СТАНІВ ЗА ВІДСУТНОСТІ ЛОКАЛЬНОЇ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ РІВНОВАГИ

§ 56. Кінетичне рівняння для заселеності атомних станів

У попередньому викладі ми послуговувались гіпотезою про локальну термодинамічну рівновагу, вважаючи, що в кожній точці атмосфера характеризується температурою $T = T(z)$. Це дозволяло користуватись формулою Больцмана для заселеностей атомних станів:

$$\rho_A = \frac{e^{-E_A/T}}{Z}, \quad (56.1)$$

де E_A — енергія атома у стані $|A\rangle$, що задається набором квантових чисел A , а сума станів

$$Z = \sum_A e^{-E_A/T}. \quad (56.2)$$

Якщо є виродження атомних рівнів із кратністю g_A , то ймовірність того, що атом перебуває у станах з енергією E_A , дорівнює

$$\rho_A = \frac{g_A e^{-E_A/T}}{Z}, \quad (56.3)$$

відповідно

$$Z = \sum_A g_A e^{-E_A/T},$$

причому тут підсумовування відбувається лише за тими квантовими числами A , які нумерують рівні енергії, а не хвильові функції.

Поле випромінювання зоряних атмосфер відрізняється від рівноважного, яке характеризується функцією розподілу Планка. Це поле взаємодіє з речовиною атмосфери зорі, тобто атомами, йонами, електронами, а в холодніших зорях — також з молекулами. Унаслідок цієї взаємодії частинки збуджуються, йонізуються і тому заселеність рівнів ρ_A залежить від поля випромінювання. Крім того, переходи з одного квантового стану в інший здійснюються і в результаті міжчастинкових зіткнень. Своєю чергою заселеність атомних станів уходить у рівняння переносу випромінювання (6.1), (8.1) через функцію джерела $S_{AA'}(\omega)$ (6.2), коефіцієнт поглинання (6.3), функцію перерозподілу за частотами (8.4) і отже, визначає поле випромінювання.

Таким чином, доходимо висновку, що потрібно спільно розв'язувати задачу про заселеність атомних станів і кінетичне рівняння для фотонів. У зв'язку з цим впливає завдання побудови кінетичного рівняння для величини ρ_A . Ми сконструюємо це рівняння за аналогією до кінетичного рівняння для фотонів, як це було зроблено в першому розділі.

Повну зміну в часі величини ρ_A дає рівняння:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = - \left\{ \begin{array}{l} \text{Імовірність зникнення} \\ \text{атома зі стану атома } |A\rangle \\ \text{за одиницю часу} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Імовірність породжен-} \\ \text{ня атома у стані } |A\rangle \\ \text{за одиницю часу} \end{array} \right\}. \quad (56.4)$$

Позначмо ймовірність переходу за одиницю часу атома зі стану $|A\rangle$ у стан $|A'\rangle$ через $w_{A \rightarrow A'}$. Імовірність зникнення за одиницю часу атома з початкового стану дорівнює ймовірності квантового переходу за одиницю часу, помноженій на заселеність цього стану. Беручи це до уваги, розпишемо праву частину рівняння

(56.4), тобто інтеграл зіткнень для цієї задачі, який потрібно буде розрахувати, розглядаючи конкретні елементарні процеси за участю цього атома:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -\rho_A \sum_{\substack{A' \\ (A' \neq A)}} w_{A \rightarrow A'} + \sum_{\substack{A' \\ (A' \neq A)}} \rho_{A'} w_{A' \rightarrow A}. \quad (56.5)$$

Зрозуміло, що підсумовування за A' іде за умови $A' \neq A$ і надалі виписувати її явно не будемо.

Як і у випадку кінетичного рівняння для фотонів, ліва частина рівняння (56.5) дорівнює

$$\frac{d\rho_A}{dt} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \rho_A, \quad (56.6)$$

де перший доданок дає зміну за одиницю часу кількості атомів у стані $|A\rangle$ у фіксованій точці простору при нестационарних процесах; другий доданок — це зміна заселеностей, спричинена переміщенням атома з однієї точки простору в іншу внаслідок макроскопічного руху речовини атмосфери зі швидкістю \mathbf{v} . У стаціонарному випадку, коли ρ_A явно не залежить від часу ($\partial \rho_A / \partial t = 0$) для нерухомої атмосфери ($\mathbf{v} = 0$), ліва частина рівняння (56.5) дорівнює нулеві, і ми отримуємо, що

$$\sum_{A'} \rho_{A'} w_{A' \rightarrow A} - \rho_A \sum_{A'} w_{A \rightarrow A'} = 0. \quad (56.7)$$

Це рівняння називають рівнянням стаціонарності або рівнянням статистичної рівноваги. Саме його потрібно розв'язувати спільно з рівнянням переносу випромінювання тоді, коли гіпотеза про локальну термодинамічну рівновагу не справджується.

Зручно розділити ймовірності $w_{A \rightarrow A'}$ на дві складові. Перша радіативна складова, позначмо її через $w_{A \rightarrow A'}^r$, спричинена взаємодією атома з випромінюванням, і отже, мова йде про переходи атома зі стану в стан з поглинанням та розсіянням фотонів. Друга частина $w_{A \rightarrow A'}^c$ описує переходи атома між квантовими станами, зумовлені зіткненнями, тобто взаємодією атома з іншими

частинками атомосфери:

$$w_{A \rightarrow A'} = w_{A \rightarrow A'}^r + w_{A \rightarrow A'}^c. \quad (56.8)$$

Узагалі кажучи, потрібно було б урахувати й перехресний інтерференційний “радіативнозіткнювальний” ефект, який виникає тому, що ймовірність квантового переходу (3.8) пропорційна до квадрата модуля матричного елемента від оператора взаємодії \hat{V} атома як з полем випромінювання, так і з частинками свого оточення. Розкриваючи квадрат модуля в (3.8) від цих двох складових оператора \hat{V} , ми отримуємо, крім двох доданків (56.8), згаданий перехресний ефект. Виправданням того, що його тут не враховуємо, є наступне: або несумісність правил відбору для зіткнень та для взаємодії з електромагнітним полем, або кутове усереднення даватимуть у результаті нульовий внесок в $w_{A \rightarrow A'}$. Однак це вимагає детальнішого з'ясування.

Тепер перед нами стоїть завдання розрахувати величини $w_{A \rightarrow A'}^r$ та $w_{A \rightarrow A'}^c$. Першу з них обчислюємо, використовуючи формули, які ми отримали в першому розділі. Що стосується другого зіткнювального доданка, то тут потрібно розглядати конкретно взаємодію вибраного атома з найбільш чисельно представленими частинками в зоряній атмосфері, тобто з електронами, атомами водню і його йонами та атомами гелію.

§ 57. Радіативна складова рівняння стаціонарності

Розрахуємо ймовірність переходу за одиницю часу атома зі стану в стан, спричинену його взаємодією з електромагнітним полем з урахуванням одно- та двофотонних процесів. Наше завдання значно спрощується, оскільки основні формули, що описують ці процеси, ми вивели в першому розділі. Отже, суттєво використаємо формули (5.8), (5.11) та (7.11), (7.13).

Почнімо розрахунки з другого доданка в рівнянні стаціонарності (56.7) і випишімо внесок до нього від переходу “вверх”, тобто квантового переходу атома з поглинанням фотона, коли

$$w_{A \rightarrow A'}^r = \sum_q w_{|A; \dots, N_q, \dots\rangle \rightarrow |A'; \dots, N_q - 1, \dots\rangle}. \quad (57.1)$$

Запроваджені тут позначення вже знайомі нам з § 4. Використавши рівняння (5.8) й означення (5.13), маємо:

$$\begin{aligned} & \rho_A \sum_{A'} w_{A \rightarrow A'}^r \text{(поглинання фотона)} \\ &= \rho_A \sum_{\substack{A' \\ (A' > A)}} \sum_q \frac{2\pi^2 e^2 N_q}{mV} f_{A'A}(q) \delta(\omega_{A'A} - \omega_k). \end{aligned} \quad (57.2)$$

Символічний запис умови $A' > A$ означає, що підсумовування ведемо за квантовими числами станів $|A'\rangle$, енергія яких є більшою, ніж стану $|A\rangle$, а це значить, що частота переходу $\omega_{A'A} > 0$. Виписування цієї умови, яка нагадує нам, що мова йде про переходи “вверх”, фактично зайве, і її можна було б опускати. Справді, оскільки завжди частота фотона $\omega_k \geq 0$, то дельта-функція в (57.2) “не пропустить” від’ємних частот $\omega_{A'A}$.

Діючи аналогічно за допомогою (5.11), знаходимо внесок переходу “вниз” у рівняння стаціонарності (56.7), тобто процесу випромінювання як спонтанного, так і вимушеного:

$$\begin{aligned} & \rho_A \sum_{A'} w_{A \rightarrow A'}^r \text{(випромінювання фотона)} \\ &= \rho_A \sum_{\substack{A' \\ (A' < A)}} \sum_q \frac{2\pi^2 e^2 (N_q + 1)}{mV} f_{AA'}(q) \delta(\omega_{AA'} - \omega_k). \end{aligned} \quad (57.3)$$

Маючи ці два вирази, ми можемо явно розписати радіативну частину рівняння стаціонарності (56.7) в наближенні однофотонних переходів, оскільки перший член у цьому рівнянні знаходимо з (57.2), (57.3) простою заміною індексів, що нумерують квантові стани атома ($A \rightarrow A'$, а $A' \rightarrow A$):

$$\sum_q \sum_{\substack{A' \\ (A' > A)}} \frac{2\pi^2 e^2}{mV} f_{A'A}(q) [\rho_{A'}(N_q + 1) - \rho_A N_q] \delta(\omega_{A'A} - \omega_k)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_q \sum_{\substack{A' \\ (A' < A)}} \frac{2\pi^2 e^2}{mV} f_{AA'}(q) [\rho_{A'} N_q - \rho_A (N_q + 1)] \delta(\omega_{AA'} - \omega_k) \\
& + \sum_{A'} (\rho_{A'} w_{A' \rightarrow A}^c - \rho_A w_{A \rightarrow A'}^c) = 0.
\end{aligned} \tag{57.4}$$

За умов локальної термодинамічної рівноваги, коли числа заповнення фотонів N_q визначаються формулою Планка (5.17), а заселеності атомних станів ρ_A — формулою Больцмана (56.1), внесок радіативних членів у рівняння стаціонарності (57.4) дорівнює, як і повинно бути, нулеві, тому що

$$\rho_{A'} (N_q + 1) - \rho_A N_q = 0, \quad A' > A, \tag{57.5}$$

$$\rho_{A'} N_q - \rho_A (N_q + 1) = 0, \quad A' < A.$$

Уведемо позначення для атомного коефіцієнта поглинання:

$$\alpha_{A'A}(q) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} f_{A'A} \delta(\omega_{A'A} - \omega_k). \tag{57.6}$$

Ця величина має розмірність квадрата довжини. Якщо її помножити на густину частинок N/V і підсумувати за квантовими числами A та A' , попередньо помноживши на заселеність початкового стану, то отримаємо вже знайомий коефіцієнт поглинання без урахування множника від вимушеного випромінювання.

Будемо вважати, що $\alpha_{A'A}(q)$ не залежить від поляризації й кутових змінних, а є лише функцією частоти ω_k . А якщо така залежність існує, то скористаємось тим, що вона не дасть суттєвого внеску, і візьмемо усереднене значення:

$$\alpha_{A'A}(q) \rightarrow \alpha_{A'A}(\omega_k) = \overline{\alpha_{A'A}(q)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \alpha_{A'A}(q). \tag{57.7}$$

Здійснимо в (57.4) перехід від підсумовування за хвильовими векторами до інтегрування за частотами та кутами згідно з (8.2) і

перешлимо рівняння стаціонарності через усереднену за кутами та підсумовану за поляризаціями інтенсивність випромінювання:

$$I_{\omega} = \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega}{4\pi} I_{\mathbf{k},\alpha}. \quad (57.8)$$

Отже, тепер, замість (57.4), маємо таке рівняння:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{A' \\ (A' > A)}} 4\pi \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\hbar\omega} \alpha_{A'A}(\omega) \left[\rho_{A'} \left(I_{\omega} + \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \right) - \rho_A I_{\omega} \right] \\ & + \sum_{\substack{A' \\ (A' < A)}} 4\pi \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\hbar\omega} \alpha_{AA'}(\omega) \left[\rho_{A'} I_{\omega} - \rho_A \left(I_{\omega} + \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \right) \right] \\ & + \sum_{A'} (\rho_{A'} w_{A' \rightarrow A}^c - \rho_A w_{A \rightarrow A'}^c) = 0. \end{aligned} \quad (57.9)$$

Радіативна частина рівняння стаціонарності є готовою для проведення конкретних розрахунків і розв'язування його спільно з рівнянням переносу випромінювання. Якщо важливими є процеси розсіяння, а також нелінійні ефекти, то до рівняння (57.9) потрібно додати внесок від двофотонних процесів.

У зв'язку з цим переходимо до вивчення двофотонних переходів. Розглядаємо спочатку процес знищення фотона з квантовим числом q і народження іншого фотона з квантовим числом q' . Беручи до уваги вираз (7.11), для цього процесу маємо:

$$\begin{aligned} & \rho_A \sum_{A'} w_{A \rightarrow A'}^r \left(\begin{array}{l} \text{знищення фотона з квантовим числом } q \\ \text{і народження іншого з квантовим числом } q' \end{array} \right) \\ & = \rho_A \sum_{A'} \sum_q \sum_{q'} \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m} \right)^2 \frac{N_q (N_{q'} + 1)}{\omega_k \omega_{k'}} \\ & = \Phi_{A'A}(q, q') \delta(\omega_{A'A} + \omega_{k'} - \omega_k), \end{aligned} \quad (57.10)$$

функція $\Phi_{A'A}(q, q')$ означена формулою (7.12).

Якщо до (57.10) додати внесок від розглянутого вище процесу, який отримуємо заміною $q \rightarrow q'$, а $q' \rightarrow q$, то матимемо повну ймовірність квантового переходу за одиницю часу зі стану $|A\rangle$ в інші стани $|A'\rangle$ за участю двох фотонів. Тепер, якщо в так отриманому виразі зробити заміну квантових чисел A на A' і навпаки, то матимемо внесок від двофотонних процесів у ймовірність переходу атома у стан $|A\rangle$ з інших станів — $|A'\rangle$. Нарешті, беручи до уваги ці обидва внески, знаходимо повний баланс двофотонних переходів:

$$\begin{aligned}
& \sum_{A'} (\rho_{A'} w_{A' \rightarrow A}^r - \rho_A w_{A \rightarrow A'}^r)_{\text{двофотонні переходи}} \\
&= \sum_{A'} \rho_{A'} \sum_q \sum_{q'} \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{\Phi_{AA'}(q, q')}{\omega_k \omega_{k'}} \\
&\quad \times N_q (N_{q'} + 1) \delta(\omega_{AA'} + \omega_{k'} - \omega_k) \\
&+ \sum_{A'} \rho_{A'} \sum_q \sum_{q'} \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{\Phi_{AA'}(q', q)}{\omega_k \omega_{k'}} \\
&\quad \times N_{q'} (N_q + 1) \delta(\omega_{AA'} + \omega_k - \omega_{k'}) \\
&- \rho_A \sum_{A'} \sum_q \sum_{q'} \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{\Phi_{A'A}(q, q')}{\omega_k \omega_{k'}} \\
&\quad \times N_q (N_{q'} + 1) \delta(\omega_{A'A} + \omega_{k'} - \omega_k) \\
&- \rho_A \sum_{A'} \sum_q \sum_{q'} \frac{(2\pi)^3}{V^2} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{\Phi_{A'A}(q', q)}{\omega_k \omega_{k'}} \\
&\quad \times N_{q'} (N_q + 1) \delta(\omega_{A'A} + \omega_k - \omega_{k'}). \tag{57.11}
\end{aligned}$$

Сам зовнішній вигляд цієї формули викликає природне бажання спростити її. З цією метою введемо атомну функцію перерозподілу за частотами

$$R_{A'A}(q, q') = \left(\frac{2\pi^2 e^2}{mc^2} \right)^2 \Phi_{A'A}(q, q') \delta(\omega_{A'A} + \omega_{k'} - \omega_k), \quad (57.12)$$

яка має розмірність “квадрат довжини, поділений на частоту” і прозорий зв’язок із функцією $R(q, q')$, означеною виразом (8.4). Будемо також уважати, що функція $R_{A'A}(q, q')$ залежить лише від частот і не залежить від кутів та поляризації:

$$R_{A'A}(q, q') \rightarrow R_{A'A}(\omega, \omega') = \overline{R_{A'A}(q, q')}, \quad (57.13)$$

тут риска означає усереднення за кутами та поляризаціями. Іншими словами, ми припускаємо, що ця достатньо слабка залежність незначно спотворить остаточні вирази, які отримаємо після інтегрування за кутами та підсумовування за поляризаціями. Розмову про це ми вже вели раніше.

Переходимо у (57.11) до інтегрування за частотами і, скориставшись властивостями симетрії функції $\Phi_{A'A}(q, q')$ (див. рівняння перед формулою (7.14)) та атомної функції перерозподілу за частотами,

$$R_{A'A}(q, q') = R_{AA'}(q', q), \quad (57.14)$$

об’єднуємо перший і четвертий та другий і третій доданки й остаточно знаходимо внесок двофотонних процесів у рівняння стаціонарності:

$$\begin{aligned} & \sum_{A'} (\rho_{Aw} r_{A' \rightarrow A}^r - \rho_{Aw} r_{A \rightarrow A'}^r)_{\text{двофотонні переходи}} \\ &= 8\pi c^2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{(\hbar\omega)^2} \int_0^\infty \frac{d\omega'}{(\hbar\omega')^2} \sum_{A'} \left\{ R_{AA'}(\omega, \omega') \right. \\ & \times \left[\rho_{A'} I_\omega \left(I_\omega + \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \right) - \rho_A I_{\omega'} \left(I_\omega + \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (57.15)$$

$$+R_{A'A}(\omega, \omega') \left[\rho_{A'} I_{\omega'} \left(I_{\omega} + \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \right) - \rho_A I_{\omega} \left(I_{\omega'} + \frac{\hbar\omega'^3}{4\pi^3 c^2} \right) \right] \left. \right\}.$$

Також легко переконаємось, що цей вираз, як і (57.4), перетворюється в нуль за умови локальної термодинамічної рівноваги.

Таким чином, якщо вираз (57.15) додати до лівої частини рівняння (57.9), ми отримаємо рівняння стаціонарності з повним урахуванням одно- та двофотонних процесів. Не зважаючи на зовнішню громіздкість отриманих формул, вони піддаються обчисленням. По-перше, наявність дельта-функції в означеннях атомних коефіцієнтів $\alpha_{A'A}(\omega)$ та $R_{A'A}(\omega, \omega')$ знімає інтегрування за частотами в (57.9) й одне інтегрування в (57.15). Інтеграл за частотою, що залишається в (57.15), не чинить якихось принципових перешкод для комп'ютерних обчислень. По-друге, як атомний коефіцієнт поглинання, так і атомна функція перерозподілу за частотами дають змогу, як ми вже бачили в попередніх розділах, значно спрощувати їх при розгляді конкретних елементарних процесів.

§ 58. Швидкості квантових переходів атома внаслідок міжчастинкових зіткнень

Дослідження внеску міжчастинкових зіткнень у рівняння стаціонарності (56.7) почнемо з обговорення реакцій, які описують безвипромінювальні переходи атома між квантовими станами. По-перше, це реакція збудження атома та гасіння його збудженого стану електроном,



Якщо в результаті зіткнення з електроном атомний електрон переходить у стан з неперервним спектром енергій, то маємо реакцію йонізації та тричастинкової рекомбінації:



На відміну від реакцій (1.1)–(1.4), які ми детально дослідили, переходи (58.1), (58.2) йдуть без випромінювання та поглинання фотонів. Ці переходи називають ударами першого роду. Ударами другого роду називають процеси зіткнення атома з іншим атомом, у результаті яких збудження переходить від одного до іншого. Ми не маємо на меті обчислювати перерізи розсіяння непружних зіткнень для усіх можливих реакцій. Проілюструємо, як це здійснити для реакції (58.1), яка відіграє головну роль у рівнянні стаціонарності для зоряних атмосфер.

Щоб знайти величину $w_{A \rightarrow A'}^c$ з (56.8), яка входить у рівняння стаціонарності, будемо виходити з загального виразу (3.6) для ймовірності переходу $w_{i \rightarrow f}$ за одиницю часу системи “атом плюс електрон” з деякого початкового стану $|i\rangle$ в кінцевий стан $|f\rangle$. Цей вираз є так званим борнівським наближенням, і умовою його застосування є великі значення енергій падаючих на атом електронів у порівнянні з різницею енергетичних рівнів для атомних електронів.

Нехай у початковому стані $|i\rangle$ атом описується хвильовою функцією $|A\rangle$, а електрон, що налітає на нього, має імпульс \mathbf{p} і описується плоскою хвилею:

$$|i\rangle = |A\rangle \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}}, \quad (58.3)$$

енергія системи

$$E_i = E_A + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (58.4)$$

де E_A — енергія атома в стані $|A\rangle$, \mathbf{r} — координата електрона в системі центра мас атома (тобто початок координат вибираємо в ядрі атома), V — об'єм системи. Для кінцевого стану нашої системи маємо:

$$|f\rangle = |A'\rangle \frac{e^{i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}},$$

$$E_f = E_{A'} + \frac{\mathbf{p}'^2}{2m}, \quad (58.5)$$

де $E_{A'}$ — енергія атома в стані $|A'\rangle$, \mathbf{p}' — імпульс електрона після зіткнення з атомом.

Імовірність переходу атома зі стану $|A\rangle$ в стан $|A'\rangle$ отримаємо з величини $w_{i \rightarrow f}$, якщо підсумуємо її за всіма імпульсами електрона в кінцевому стані \mathbf{p}' , усереднимо за початковими імпульсами \mathbf{p} і помножимо все це на кількість електронів N_e , які є в об'ємі V . Отже, з урахуванням сказаного, беручи до уваги (3.6), (58.3)–(58.5), маємо:

$$w_{A \rightarrow A'}^c = N_e \left\langle \sum_{\mathbf{p}'} w_{i \rightarrow f} \right\rangle, \quad (58.6)$$

де

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle A' | \int d\mathbf{r} \frac{e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} U \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} | A \rangle \right|^2 \times \delta \left(E_{A'} + \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} - E_A - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right), \quad (58.7)$$

а енергія взаємодії електрона з атомом

$$U = \sum_{j=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (58.8)$$

тут Z — заряд ядра атома, \mathbf{r}_j — координата j -ого електрона відносно ядра. Кутовими дужками в (58.6) позначаємо усереднення за початковими імпульсами електрона, що падає на атом¹.

¹Ми неодноразово використовували різні операції усереднення, і в зв'язку з цим цікаво знати, як виникли такі науки як теорія ймовірностей та математична статистика. Узагальнене поняття середнього як математичного сподівання ввів ще Християн Гюйгенс (1629–1695). Видатний голландський учений почав займатись теорією ймовірності після відвідин Парижа 1665 року, де він ознайомився із задачею про справедливий розподіл ставки в азартних іграх. Їхньою теорією тоді займались видатні французькі вчені П'єр Ферма (1601–1665) та Блез Паскаль (1623–1662), якого 1653 року зацікавив цими

Унаслідок ортогональності хвильових функцій атомних станів другий доданок в енергії (58.8) не дає внеску у вираз (58.7). Тому матричний елемент, що входить під знак модуля в (58.7), дорівнює:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle A' \left| \int d\mathbf{r} \frac{e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} U \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \right| A \right\rangle \\
 &= \frac{1}{V} \left\langle A' \left| \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{j=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right| A \right\rangle \\
 &= \frac{1}{V} \left\langle A' \left| \sum_{j=1}^Z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} \frac{e^2}{R} \right| A \right\rangle \\
 &= \frac{4\pi e^2}{Vq^2} \left\langle A' \left| \sum_{j=1}^Z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} \right| A \right\rangle, \tag{58.9}
 \end{aligned}$$

проблемами знаній у ту пору любитель азартних ігор Шевальє де Мере, і цим заклали основи теорії ймовірностей, листуючись у 1654 році. Постановка цієї задачі проста. Гравці домовились про те, що той з них буде у вигравші, хто перший виграє N партій. Але гра (з різних причин) припиняється раніше. Кожен гравець виграв певну кількість партій, меншу, ніж N , і постає питання, як справедливо розділити ставки. Задача ця відома із середньовіччя, на неї були витрачені чималі зусилля великих математиків, починаючи з Джероламо Кардано (1501–1576). Уважають, що справедливий поділ ставки потрібно робити пропорційно до ймовірності вигравшу всієї ставки при продовженні гри, хоча, за словами італійського математика Нікколо Тартальї (1499–1557), розв'язок цього питання є радше справою юриспруденції, ніж розуму...

Відзначимо, що самі азартні ігри винайшли ще під час десятирічної облоги Трої, мабуть, щоб бодай чимось забавити воїнів і відволікти їх від вимушеної бездіяльності. Отже, як бачимо, азартні ігри відіграли виняткову роль у створенні теорії ймовірностей. Зрозуміло, що немалий вплив на її розвиток зробили задачі комерції, статистики, страхової справи, обробки експериментальних вимірювань у природничих науках, але фактично саме азартні ігри були першим поштовхом для великих математиків до творення цієї науки. Це набуває ще цікавішого забарвлення, коли пригадати, що азартні ігри забороняли і Церква, і королівські та царські закони.

де

$$\mathbf{q} = (\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar. \quad (58.10)$$

Ми перейшли в другій рівності формули (58.9) від інтегрування за \mathbf{r} до інтегрування за $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$ (якобіан такого лінійного перетворення дорівнює одиниці) і скористались виразом для коефіцієнта Фур'є кулонівського потенціалу.

Тепер, підставляючи вираз (58.9) у (58.7), з (58.6) знаходимо:

$$w_{A \rightarrow A'}^c = N_e \left\langle \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{4\pi e^2}{Vq^2} \right)^2 \right. \quad (58.11)$$

$$\left. \times \left| \langle A' | \sum_{j=1}^Z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} | A \rangle \right|^2 \delta \left(E_{A'} - E_A + \frac{p'^2 - p^2}{2m} \right) \right\rangle.$$

Перейдімо від підсумовування за імпульсами \mathbf{p}' до інтегрування, маючи на увазі перехід до $V \rightarrow \infty$, з наступним переходом до інтегрування у сферичних координатах:

$$\sum_{\mathbf{p}'} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty p'^2 dp' \int d\Omega', \quad (58.12)$$

$$\int d\Omega' = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta,$$

де азимутальний і широтний кути φ, θ визначають напрямок вектора \mathbf{p}' . Дельта-функція в (58.11) дозволяє з урахуванням (58.12) зняти інтегрування за p' , якщо використати таку її властивість:

$$\delta \left(E_{A'} - E_A + \frac{p'^2 - p^2}{2m} \right) = \frac{m}{p'} \delta \left(p' - \sqrt{p^2 - 2m(E_{A'} - E_A)} \right).$$

Можна також проінтегрувати за азимутальним кутом φ , оскільки від нього не залежить підінтегральна функція. Інтегрування за

широтним кутом θ “перекидаємо” на інтегрування за q з (58.10):

$$q^2 = \frac{p'^2 + p^2 - 2pp' \cos \theta}{\hbar^2},$$

і для заданих величин p' та p

$$q dq = \frac{pp'}{\hbar^2} \sin \theta d\theta.$$

Зауважуємо також, що квадрат модуля матричного елемента в (58.11) не залежить від напрямку вектора \mathbf{q} .

Отже, беручи все сказане до уваги, з (58.11) знаходимо:

$$w_{A \rightarrow A'}^c = 8\pi m \frac{N_e}{V} \left(\frac{e^2}{\hbar} \right)^2 \times \left\langle \frac{1}{p} \int_{|p'-p|/\hbar}^{|p'+p|/\hbar} \left| \langle A' | \sum_{j=1}^Z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} | A \rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3} \right\rangle, \quad (58.13)$$

де

$$p' = \sqrt{p^2 - 2m(E_{A'} - E_A)},$$

причому мінімальне, порогове значення початкового імпульсу p дорівнює

$$p_0 = \sqrt{2m(E_{A'} - E_A)}. \quad (58.14)$$

Якщо величина q є малою, тобто $qa < 1$, a — розміри атома, то експоненту в матричному елементі під інтегралом (58.13) можна розкласти в ряд і, зважаючи на ортогональність атомних хвильових функцій, знаходимо, що

$$\langle A' | \sum_{j=1}^Z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} | A \rangle = \langle A' | 1 - i\mathbf{q} \sum_{j=1}^Z \mathbf{r}_j + \dots | A \rangle = -iq \langle A' | \sum_{j=1}^Z x_j | A \rangle.$$

При обчисленні цього матричного елемента вісь x спрямовуємо уздовж \mathbf{q} . Якщо тепер пригадати означення сили осцилятора для переходу $|A\rangle \rightarrow |A'\rangle$ з (11.7), то отримаємо:

$$\left| \langle A' | \sum_{j=1}^Z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} | A \rangle \right|^2 = q^2 \frac{\hbar^2}{2m\omega_{A'A}} f_{A'A}, \quad (58.15)$$

де $\omega_{A'A} = (E_{A'} - E_A)/\hbar$ — частота переходу.

З виразом (58.15) інтегрування за q в (58.13) стає елементарним:

$$w_{A \rightarrow A'}^c = \frac{4\pi N_e}{V} \frac{e^4}{\hbar\omega_{A'A}} f_{A'A} \left\langle \frac{1}{p} \ln \left| \frac{1 + \sqrt{1 - \hbar\omega_{A'A}/\frac{p^2}{2m}}}{1 - \sqrt{1 - \hbar\omega_{A'A}/\frac{p^2}{2m}}} \right| \right\rangle. \quad (58.16)$$

Ця формула застосовна для дипольних переходів. Тобто вона працює для оптично дозовлених квантових переходів, коли сила осцилятора $f_{A'A}$ відмінна від нуля.

Коли імпульси електронів, що налітають на атом, є великими, тобто, якщо максимум функції розподілу за імпульсами, з якою відбувається усереднення в (58.16), зсунуто в ділянку $p > \sqrt{2m\hbar\omega_{A'A}}$, то

$$\sqrt{1 - \hbar\omega_{A'A}/\frac{p^2}{2m}} \simeq 1 - \frac{m}{p^2} \hbar\omega_{A'A}$$

і формула (58.16) дає добре відоме наближення Бете²:

$$w_{A \rightarrow A'}^c = \frac{4\pi N_e}{V} \frac{e^4}{\hbar\omega_{A'A}} f_{A'A} \left\langle \frac{1}{p} \ln \left(\frac{2p^2}{m\hbar\omega_{A'A}} \right) \right\rangle. \quad (58.17)$$

²Ганс Бете — американський фізик-теоретик, зробив видатний внесок у різні напрямки фізичної науки (квантова механіка, ядерна фізика, теорія твердого тіла, теорія ядерних реакторів, астрофізика). За внесок у теорію ядерних реакцій і, особливо, за відкриття циклу термоядерних реакцій, які є джерелом енергії зір, Г. Бете було нагороджено Нобелівською премією 1967 року.

Припустимо, що розподіл електронів за імпульсами можна характеризувати максвеллівською функцією з деякою “електронною” температурою T_e . Це не суперечить тому, що розподіл за квантовими станами $|A\rangle$ в підсистемі атомів є нерівноважним. Таке припущення дає змогу виконати в (58.17) усереднення за імпульсами:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \frac{1}{p} \ln \left| \frac{1 + \sqrt{1 - \hbar\omega_{A'A} / \frac{p^2}{2m}}}{1 - \sqrt{1 - \hbar\omega_{A'A} / \frac{p^2}{2m}}} \right| \right\rangle \\
 &= \int d\mathbf{p} \frac{e^{-p^2/2mT_e}}{(2\pi m T_e)^{3/2}} \frac{1}{p} \ln \left| \frac{1 + \sqrt{1 - (p_0/p)^2}}{1 - \sqrt{1 - (p_0/p)^2}} \right| \quad (58.18) \\
 &= \frac{4\pi}{(2\pi m T_e)^{3/2}} \int_{p_0}^{\infty} e^{-p^2/2mT_e} p \ln \left| \frac{p/p_0 + \sqrt{(p/p_0)^2 - 1}}{p/p_0 - \sqrt{(p/p_0)^2 - 1}} \right| dp \\
 &= \frac{2\pi p_0^2}{(2\pi m T_e)^{3/2}} e^{-p_0^2/2mT_e} \int_0^{\infty} e^{-up_0^2/2mT_e} \ln \left| \frac{\sqrt{1+u} + \sqrt{u}}{\sqrt{1+u} - \sqrt{u}} \right| du.
 \end{aligned}$$

Ми зробили заміну змінної інтегрування

$$u = \left(\frac{p}{p_0} \right)^2 - 1,$$

де порогове значення імпульсу p_0 задано виразом (58.14). Підставляємо вираз (58.18) у формулу (58.16) і знаходимо:

$$w_{A \rightarrow A'}^c = \frac{8\pi N_e e^4 f_{A'A}}{V \hbar\omega_{A'A}} \frac{1}{\sqrt{2\pi m T_e}} w_{A \rightarrow A'}^*, \quad (58.19)$$

де знерозмірена швидкість квантових переходів

$$w_{A \rightarrow A'}^* = \frac{\hbar\omega_{A'A}}{T_e} e^{-\hbar\omega_{A'A}/T_e} \int_0^{\infty} e^{-u\hbar\omega_{A'A}/T_e}$$

$$\times \ln \left| \frac{\sqrt{1+u} + \sqrt{u}}{\sqrt{1+u} - \sqrt{u}} \right| du. \quad (58.20)$$

Інтегрування в цьому виразі можна виконати чисельно. Нагадаємо, що сила осцилятора $f_{A'A} \sim \omega_{A'A}$, тому ми виділили в знаменнику коефіцієнта при $w_{A \rightarrow A'}^*$ у формулі (58.19) частоту переходу.

Для малих частот переходу $\omega_{A'A}$ можна знайти хід функції $w_{A \rightarrow A'}^*$ в явному вигляді. Для цього в інтегралі (58.20) зручно зробити заміну змінних $x = u\hbar\omega_{A'A}/T_e$.

У результаті:

$$w_{A \rightarrow A'}^* = e^{-\hbar\omega_{A'A}/T_e} \int_0^\infty e^{-x} \ln \left| \frac{\sqrt{1 + \hbar\omega_{A'A}/xT_e} + 1}{\sqrt{1 + \hbar\omega_{A'A}/xT_e} - 1} \right| dx. \quad (58.21)$$

Якщо виконується умова $\hbar\omega_{A'A}/T_e \ll 1$, то логарифм під інтегралом переходить в $\ln(4T_e x / \hbar\omega_{A'A})$ й інтеграл зводиться до табличного (див. інтеграл, який ми наводили після формули (36.12)):

$$w_{A \rightarrow A'}^* = \ln \left(\frac{4T_e}{\gamma\hbar\omega_{A'A}} \right), \quad (58.22)$$

γ — стала Ейлера. По суті, це є формула Бете (58.17), у якій виконано усереднення за імпульсами.

Якщо величина q не є малою, то обчислення швидкості переходів $w_{A \rightarrow A'}$ потрібно проводити за формулою (58.13) без розкладу експоненти в ряд: спочатку за відомими атомними хвильовими функціями $|A\rangle$ та $|A'\rangle$ розраховуємо матричний елемент і після цього виконуємо інтегрування за q . Тим самим ми врахуємо переходи, які є оптично забороненими в дипольному наближенні.

Детальнішу інформацію про методи обчислень перерезів квантових переходів для інших елементарних процесів можна знайти в [31, 32]. Зокрема, можна розрахувати швидкості квантових переходів і для реакцій (58.2), що описують йонізацію та тричастинкову рекомбінацію. У цьому випадку кінцевий стан $|A'\rangle$ атомного електрона у формулі (58.13) є в неперервному спектрі енергій.

При малих швидкостях налітаючого електрона потрібно врахувати обмінні ефекти, тобто необхідно проводити симетризацію двоелектронної хвильової функції кінцевого стану налітаючого електрона й електрона, що вивільнився. Імовірності зворотних реакцій, гасіння збудженого стану чи тричастинкової рекомбінації також обчислюються подібно, якщо поміняти місцями початкові й кінцеві стани.

Післямова

Ми дійшли кінця своєї розповіді про фізичні та математичні механізми, що творять характерний візерунок спектра електромагнітного випромінювання зір. Нашою метою було виведення з першопринципних рівнянь квантової механіки багатьох частинок як самого рівняння переносу випромінювання в зоряних атмосферах, так і розрахунку тих величин, що входять у нього. При цьому впродовж усієї книжки ми дотримувались необхідного рівня математичної культури викладу матеріалу. Беручи до уваги те, що книжка адресована насамперед Читачеві-студентові, автор намагався в кожному параграфі чітко формулювати постановку задачі і послідовно, з детальними обчисленнями, не залишаючи такими зворотами як “легко бачити” якихось неясностей, доводити результати до вигляду, з яким безпосередньо працюють дослідники зоряних спектрів.

Автор розуміє нетерпіння Читачів, які перегортають сторінки з проміжними формулами і шукають остаточних виразів, додатних до прикладних задач зоряної спектроскопії. Але потрібно також знати, за яких умов вони отримані, що ми “втрачаємо” і чим “платимо” в наближеннях і припущеннях на шляху отримання остаточних робочих формул. Це особливо важливо тепер, коли доведення результатів до числа завдяки комп’ютерним можливостям не потребує якихось зайвих спрощень, і отже, маємо можливість відчувати в чистому вигляді якість наших концептуальних припущень, що, своєю чергою, дозволяє мати тонше розуміння фізичних явищ при аналізі конкретних зоряних атомосфер.

Наша книжка не для тих, хто шукає “царської дороги” до глибокого розуміння явищ Природи і думає, що все можна пояснити наочно. Справжня краса явищ лежить не на поверхні, виявлення її потребує значних зусиль, а пояснення “на пальцях” має свої межі. Формули — це не просто мова, вони, як і ноти в музиці, договорюють те, чого не можна пояснити словами.

Увага людини до неба та його “ мешканців ” — космічних об’єктів, мабуть, ще з доісторичних часів увесь час зростає, і автор сподівається, що ця книжка буде корисною для всіх, хто вивчає

зоряні атмосфери, а також, що вона допоможе молодим астрофізикам, які обрали такий шлях у науці, ідучи яким людина отримує інтелектуальне й естетичне задоволення не лише від споглядання нічного неба, а й від глибокого фізичного розуміння через всеохоплюючу силу математики того фундаментального факту, що природа й рух небесних тіл об'єднані дивовижною і вражаючою Гармонією.

Бібліографія

- [1] *Унзольд А.* Физика звездных атмосфер. М.: Государственное издательство иностранной литературы, 1949.
- [2] *Чандрасекар С.* Перенос лучистой энергии. М.: Иностранная литература, 1953.
- [3] *Мустель Э. Р.* Звездные атмосферы. М.: Физматгиз, 1960.
- [4] *Соболев В. В.* Курс теоретической астрофизики. М.: Наука, 1967.
- [5] *Иванов В. В.* Перенос излучения и спектры небесных тел. М.: Наука, 1969.
- [6] *Каули Ч.* Теория звездных спектров. М.: Мир, 1974.
- [7] *Михалас Д.* Звездные атмосферы. В 2-х частях. М.: Наука, 1982.
- [8] *Вакарчук І. О.* Квантова механіка. Львів: Львівський державний університет ім. І. Франка, 1998.
- [9] *Гуртовенко Э. А., Костык Р. И., Орлова Т. В.* Профили избранных фраунгоферовых линий для разных положений центр-край на диске Солнца. Киев: Наукова думка, 1975.
- [10] *Гайтлер В.* Квантовая теория излучения. М.: Иностранная литература, 1956.
- [11] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. М.: Наука, 1973.

- [12] *Сугаков В. Й.* Електродинаміка. К.: Вища школа, 1974.
- [13] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика, М.: Наука, 1973.
- [14] *Вакарчук І. О.* Квантова теорія переносу випромінювання в зоряних атмосферах. Львів: Львівський державний університет ім. І. Франка, 1985.
- [15] *Грей Д.* Наблюдения и анализ звездных фотосфер. М.: Мир, 1980.
- [16] Звездные атмосферы. Под. ред. *Дж. Л. Гринстейна.* Перевод с английского под. ред. В. В. Соболева. М.: Изд-во иностранной литературы, 1963.
- [17] *Гибсон Э.* Спокойное Солнце. М.: Мир, 1977.
- [18] *Гуртовенко Э. А., Костык Р. И.* Фраунгоферов спектр и система солнечных сил осцилляторов. Киев: Наукова думка, 1989.
- [19] Справочник по специальным функциям. Под. ред. *М. Абрамовца, И. Стриган.* М.: Наука, 1979.
- [20] *Вакарчук І. О.* Вступ до проблеми багатьох тіл. Львів: Львівський національний університет імені Івана Франка, 1999.
- [21] *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963.
- [22] *Грим Г.* Уширение спектральных линий в плазме. М.: Мир, 1978.
- [23] *Ситенко О. Г.* Теорія розсіяння. К.: Либідь, 1993.
- [24] *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. Т.2. М.: Иностранная литература, 1957.

- [25] *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Госиздат физико-математ. лит., 1960.
- [26] *Ленг К.* Астрофизические формулы. Ч. 1. М.: Мир, 1978.
- [27] *Радциг А. А., Смирнов Б. М.* Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1986.
- [28] *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1973.
- [29] *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. М.: Наука, 1969.
- [30] *Аллен К. У.* Астрофизические величины. М.: Мир, 1977.
- [31] *Смирнов Б. М.* Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М.: Атомиздат, 1968.
- [32] *Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А.* Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979.

Предметний покажчик¹

- Адіабатичне наближення 108
Амплітуда розсіяння 149, 150
Апаратна функція 167
Вайскопфа-Ліндгольма наближення 209
Випромінювання
— абсолютно чорного тіла 17, 315
— індуковане 39, 78, 79
— реліктове електромагнітне 22, 72
— спонтанне 39, 65
— чорне 43
Від'ємний йон водню 226, 257 і далі
Глибина лінії 20, 21, 24, 97, 299 і далі
Дебаївський радіус 121, 220
Доплерівський зсув частоти 90, 163, 326
Електричний дипольний момент 111, 194, 197
Електричний квадрупольний момент 111, 194
Еквівалентна ширина лінії 22, 24, 98, 301, 303, 322, 323, 331
Заселеність атомних станів 32, 42, 332, 333
Згортка контурів 99, 132, 145
Зеєманівське розширення 156
Зоряні атмосфери 10, 18, 19, 24, 121, 266
Зсув фаз 151
Ізотопічний ефект 164
Інверсний шар 301, 302
Інструментальний контур 167
Інтеграл зіткнень 29, 31, 34, 35, 40, 51, 334
Константа тонкої структури 35, 76, 249
Контур
— гауссівський 156, 137, 141, 132
— доплерівський 99, 100, 132
— лоренцівський 62, 65, 81, 83, 99, 102, 132, 137, 141, 147 і далі
— спектральної лінії 20, 80, 99, 112, 167, 212, 299 і далі
— штарківський 132, 137, 141, 156
Локальна термодинамічна рівновага 11, 32, 42, 53, 84, 108, 271, 292, 325, 337, 341
Макротурбулентність 84, 91, 95, 96, 99
Мікротурбулентність 84, 91, 92, 95, 99
Мультипольний розклад 194
Мультипольні моменти 195, 199
Одиничний вектор поляризації 25, 277, 284, 325
Оператор
— знищення фотона 26, 36, 34
— зсуву 100, 110, 193
— породження фотона 26, 36, 38
Оптична глибина 294, 295, 307, 311
Оптичний електрон 12, 75, 147, 173, 269, 277

¹Цей покажчик доповнює назви розділів та параграфів у змісті книжки і практично не повторює їх.

- Параболічні квантові числа
198
- Параметр непружних зіткнень
202, 211
- Переходи
— вільно-вільні 12, 27, 44,
226, 235, 240, 244, 246,
247, 256, 258
— вільно-зв'язані 27
— дипольні 35, 74, 87, 135,
173, 347
— зв'язано-вільні 12, 44,
226, 240, 250, 252, 256,
258, 260
— зв'язано-зв'язані 44, 81
— квадрупольні 35, 87
- Переріз
— зіткнення 148
— розсіяння 199, 285
- Плоско-паралельна атмосфера
29, 41, 52, 308, 319
- Показник заломлення 28, 75,
287
- Потік
— астрофізичний 18
— вихідний 17
— вхідний 17
— едінгтонівський 18
— повний 15, 16, 17, 311,
315
- Правило сум 24, 168, 169
- Радіаційна стала загасання
289
- Радіаційна ширина
спектральної лінії 78, 82
- Резонансна флюоресценція
35, 288
- Рівняння статистичної
рівноваги 334
- Розсіяння
— вперед 281
— когерентне 55, 267, 282
— комбінаційне 55, 267, 272
— некогерентне 55, 267
— непружне 22
— пружне 199
— релєївське 288
— томсонівське 285
- Сильні лінії 21
- Слабкі лінії 21, 321, 322, 324
- Сонячні сили осцилятора 190
- Статистична вага 191, 246,
271, 322
- Сферично-симетрична
атмосфера 30
- Тиск
— випромінювання 319
— газовий 319
- Удари
— другого роду 342
— першого роду 342
- Фактор Гаунта 185, 242
- Фотосфера 11, 108, 293, 300
- Фраунгоферові лінії 21, 24,
302
- Функція внеску 300
- Функція джерела 42, 43, 292,
302
- Хімічний вміст 190, 301, 321,
324
- Ядерний квадрупольний
резонанс 164

Іменний покажчик

- Айнштайн А., 18, 26, 41, 56, 230
Бабій Б., 24
Бальмер Й. Я., 181
Бете Г., 347, 349
Блуа Л., 321
Бозе, 18, 26
Больцман, 16, 29, 95, 286, 311,
319, 332, 337
Бор Н., 87, 156, 165, 174
Борн М., 227
Бройль Л. де, 113, 227, 236, 260
Вайскопф, 209
Ван дер Ваальс, 199, 218
Вільсон Р. В., 22, 72
Він В., 43, 188
Віхерт, 60
Волластон В. Г., 21
Гайзенберг В. К., 13, 169
Гартрі, 188
Гільберт Д., 56
Гоголь М. В., 149
Гольцмарк, 127, 129, 130 і далі
Гюйгенс Х., 343
Гіббс Д. У., 32, 42, 53, 108
Дебай П. Й. В., 121, 225, 251
Дірак П. А. М., 13, 70, 100, 136,
141
Допплер Х., 84, 90, 107, 112,
113, 268, 272, 276, 281, 329
Еддінгтон А. С., 18
Ейлер, 200, 223, 262, 349
Елві К., 93
Ерміт, 170, 171
Кардано Дж., 344
Кельвін, 16, 32
Кеплер, 184
Кронекер, 86, 87, 89, 194, 270
Кун В., 169, 242
Курльбаум Ф., 43
Лагерр, 176
Лайман Г., 135, 173, 181
Лаплас, 195, 224
Лежандр, 312, 313
Леннард-Джонс, 123, 216
Ліенар, 60
Ліндгольм, 209
Лоренц Г., 60, 81, 83, 90, і далі
Максвелл Дж. К., 13, 84
Мере Ш. де, 344
Мілн Е., 301, 311
Паскаль Б., 343
Пензіас А. А., 22, 72
Планк М., 43, 44, 57, 79,
302, 309, 310, 318, 333
Райхе Ф., 24, 169, 242
Релей Дж. У., 288
Рубенс Г., 43
Саха М., 256
Стефан, 16, 311, 319
Струве О., 93
Тарталья Н., 344
Томас В., 169, 242, 252
Томсон Дж. Дж., 285
Унзольд А., 99
Фаулер А., 259
Ферма П., 343
Фермі Е., 252
Фойгт В., 90, 95, 99,
102, 103, 104, 291, і далі
Фок, 188
Фраунгофер Й., 21
Фур'є Ж. Б. Ж., 62, 63, 116,
117, 238, 239, 345
Чандрасекгар С., 259
Шварцшільд К., 18, 301, 311
Шредингер Е., 13, 45, 66, 67,
72, 231
Шустер А., 301, 302, 311

Навчальне видання

ВАКАРЧУК
Іван Олександрович

ТЕОРІЯ ЗОРЯНИХ СПЕКТРІВ

Допущено Міністерством освіти і науки України
як підручник для студентів астрономічних
та фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів

Мовна редакція *Марія Білоус*
Художнє оформлення *Федір Лукавий*
Технічна редакція *Софія Довба*

Підписано до друку 09.07.2002. Формат 60 × 90¹/₁₆.
Папір офс. Гарн. School Book. Друк офс. Умовн. друк.
арк. 22,5. Умовн. фарбовідб. 22,87. Обл. вид. арк. 19,96.
Тираж 3000 прим. Зам. .

Львівський національний університет імені Івана Франка
79000, Львів, вул. Університетська, 1

Видавничо-виробниче підприємство “Місіонер”.
80300, м. Жовква Львівської області, вул. Василянська, 8
Зам. .